МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

В.Й. Котовський, Л.Ю. Цибульский

КОМПЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ. СТВОРЕННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ЧИСЕЛЬНИМ МЕТОДОМ

*Рекомендовано Методичною радою
КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для студентів,
які навчаються за спеціальністю 104 - "Фізика та астрономія",
спеціалізацією "Комп'ютерне моделювання фізичних процесів"*

Рецензент *Маслов В.П.*, завідуючий відділом Інституту фізики напівпровідників ім.. В.Є. Лашкарьова НАН України, докт. техн. наук, професор.

Відповідальний редактор *Матвійчук О.В.*, канд. педагог. наук, доцент, кафедри загальної фізики та фізики твердого тіла КПІ ім. Ігоря Сікорського.

Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
(протокол № 1 від 26.09.2019 р.)
за поданням Вченої ради фізико-математичного факультету
(протокол № 7 від 10.09.2019 р.)

Електронне мережне навчальне видання

Віталій Йосипович Котовський, докт. техн. наук, проф.,
Леонід Юрійович Цибульский, канд. техн. наук, доц..

КОМПЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ. СТВОРЕННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ЧИСЕЛЬНИМ МЕТОДОМ

Комп'ютерне моделювання фізичних процесів. Створення та дослідження фізичних моделей чисельним методом: для студентів та аспірантів спеціальності 104 – «Фізика та астрономія», спеціалізації «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів» / В.Й. Котовський, Л.Ю. Цибульский; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 12,46 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. – 130 с.

Мета роботи полягає в наданні допомоги студентам при їх самостійній роботі. У навчальному посібнику «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів. Створення та дослідження фізичних моделей чисельним методом» послідовно розглянуто етапи створення фізичної моделі та її дослідження в комп'ютерній програмі COMSOL Multiphysics. На прикладах показані можливості програми в усіх галузях фізичного та інженерного моделювання, які обмежені тільки метою та освітнім рівнем дослідника.

Навчальний посібник призначений для студентів, які навчаються за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія», спеціалізації «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів», може бути корисним студентам інших спеціальностей та спеціалізацій.

ЗМІСТ

ВСТУП

Моделювання фізичних процесів у більшості випадків сучасних наукових та технічних задач засноване на використанні методів чисельного моделювання. Розробники прикладних комп'ютерних програм пропонують низку програмних продуктів, які здатні з необхідною точністю надати велике коло можливостей для найбільш швидкої і якісної побудови та дослідження фізичних моделей. Найбільш розвиненим та адаптованим до потреб системного фізичного дослідження є пакет програм COMSOL Multiphysics [1] компанії COMSOL. Пропоновані програми пакету COMSOL дозволяють моделювати й досліджувати складні фізичні явища, з урахуванням впливу оточення і ефективно обробляти результати експериментів. Програмний пакет COMSOL Multiphysics широко поширений в науковому та інженерному світі: в дослідницьких інститутах і лабораторіях, а також на великих підприємствах. Компанія COMSOL постійно розвиває свій продукт як за об'ємом фізичних процесів, так і за функціональними можливостями дослідника або інженера. Чисельні модулі включають спеціальні інструменти симуляції фізичних процесів в електронних приладах, включаючи розв'язки задач в області мікро- та наноелектроніки, приладів НВЧ та схемотехніки, задачах механічної міцності та напруження, хімічній інженерії та технології, для вивчення процесів у навколишньому середовищі, акустичних явищ, проектування систем теплопередачі, і всієї відомої фізики взагалі. Пакет програм COMSOL Multiphysics є необхідним інструментом як для студентів фізичних, фізико-технічних, механіко-математичних і т.д. факультетів при вивченні різних фізичних та хімічних явищ, так і для якісних досліджень аспірантів, пошукувачів та вчених, що моделюють та досліджують фізичні процеси.

Пакет програм COMSOL Multiphysics повністю відкритий для користувача, що дозволяє моделювати практично всі фізичні процеси, які описуються алгебраїчними та диференціальними рівняннями в часткових похідних (PDE). Для цього достатньо використати модуль відповідного фізичного явища. В кожному разі дослідник може змінити вбудоване у відповідний модуль COMSOL рівняння, або задати своє рівняння, при цьому не змінюючи програмний код. Чисельні вирішувачі, дозволяють здійснювати необмежене моделювання складних фізичних систем, які взаємодіють одна з одною.

Чисельний розрахунок проводиться методом кінцевих елементів (FEM). Взаємодія із програмою можлива через графічний інтерфейс користувача (GUI), або за допомогою програмування скриптів мовою COMSOL SCRIPT або MATLAB. COMSOL SCRIPT, яка інтегрується з COMSOL MULTIPHYSICS може працювати як самостійний пакет. Ця мова-інтерпретатор включає більш 600 команд для чисельних розрахунків і візуалізації в режимі командного рядка, а також дозволяє створювати скрипти (процедури, записані в текстовому форматі). Відзначимо, що програма дозволяє з'єднувати моделі в різною геометрією і зв'язувати між собою моделі у різних розмірностях.

Означимо послідовність використання функцій пакету COMSOL MULTIPHYSICS:

– вибір розмірності моделі (1D, 2D, 3D);

– вибір одного або декількох шаблонів дослідження з додатків (APPLICATION MODE);

– побудова геометрії або імпорт її із зовнішньої CAD-системи;

– вибір фізики для моделі, встановлення граничних умов і вибір субдомену;

– генерація сітки (у вільному режимі або з інтерактивним вибором параметрів сітки);

– розв'язок задачі (стаціонарна, нестаціонарна, параметрична, на пошук власних значень);

– обробка результатів (упорядкування, виділення, об'єднання, форматування, анімація та ін.).

COMSOL MULTIPHYSICS інтегрується з різними САПР додатками й дозволяє імпортувати файли у форматі DXF і IGES, забезпечує ефективний обмін даними з популярними продуктами геометричного моделювання (Autodesk, Inventor, Solidworks, CATIA, Pro/E, NX, Solidedge і т.д.).

COMSOL MULTIPHYSICS реалізований для операційних систем Windows, Mac, Linux, UNIX.

1 МЕТОД КІНЦЕВИХ ЕЛЕМЕНТІВ

Найбільш загальним і досить ефективним методом чисельного розрахунку фізичних процесів у моделях складних систем є метод кінцевих елементів (МКЕ) [2]. Тому на основі МКЕ проводяться розрахунки передовими обчислювальними пакетами програм, такими як:

– ANSYS – універсальна система аналізу МКЕ із вбудованим пре-/постпроцесором;

– MSC.Nastran – універсальна система аналізу МКЕ із пре-/постпроцесором MSC.Patran;

– ABAQUS – універсальна система аналізу МКЕ із вбудованим пре-/постпроцесором;

– Impact – універсальна система аналізу МКЕ із вбудованим пре-/постпроцесором;

– Neinastran – універсальна система аналізу МКЕ із пре-/постпроцесором FEMAP;

– Nxnastran – універсальна система аналізу МКЕ із вбудованим пре-/постпроцесором FEMAP;

– SAMCEF – універсальна система аналізу МКЕ із вбудованим пре-/постпроцесором SAMCEF Field;

– Temper-3D – система аналізу МКЕ для розрахунків температурних полів у трьохмірних конструкціях (теплотехнічний розрахунки);

– COMSOL MULTIPHYSICS – універсальна система аналізу МКЕ із пре-/постпроцесором;

– NX Nastran – універсальна система аналізу МКЕ;

– Zebulon – універсальна система аналізу МКЕ з розширеною бібліотекою нелінійних моделей матеріалів.

Виникнення МКЕ пов’язане з розв’язком задач космічних досліджень, а ідея МКЕ була розроблена радянськими вченими в 1936 році. Цей метод виник з будівельної механіки та теорії пружності, а вже потім було отримано його математичне обґрунтування. Важливий внесок у теоретичну розробку методу зробив Мелош [3], який показав, що метод кінцевих елементів можна розглядати як один з варіантів добре відомого методу Релея-Рітца. Наприклад, у будівельній механіці МКЕ мінімізацією потенційної енергії дозволяє звести задачу до системи лінійних рівнянь рівноваги. Після того як був установлений зв'язок МКЕ с процедурою мінімізації, він став застосовуватися до задач, описуваних рівняннями Лапласа або Пуассона. Після одержання рівнянь, що визначають елементи в задачах з варіантів методу зважених нев'язань (метод Гальоркіна, метод найменших квадратів і ін.), МКЕ став базовим методом чисельних розрахунків для моделювання фізичних процесів. У цей час метод кінцевих елементів є загальним методом чисельного розв'язку диференціальних рівнянь або систем диференціальних рівнянь.

У розділі розглянуто ідеологію МКЕ і його особливості при чисельному моделюванні фізичних процесів. Посилання на літературу по МКЕ включаючи історію його розвитку і т.д., можна знайти в [2]. У даному розділі викладені основні ідеї МКЕ [4], які необхідно знати для моделювання фізичних процесів в COMSOL MULTIPHYSICS.

Як відзначалося, пакет програм COMSOL MULTIPHYSICS має чисельний набір модулів:

– COMSOL MULTIPHYSICS – дозволяє моделювати практично всі фізичні процеси, які описуються диференціальними рівняннями в частинних похідних;

– COMSOL CAD IMPORT MODULE – заснований на геометричних алгоритмах Parasolid і включає ACIS для підтримки формату SAT. На додаток до рідних форматів Parasolid і SAT модуль CAD IMPORT також підтримує STEP і IGES формати файлів;

– COMSOL CHEMICAL ENGINEERING – призначений для вивчення поведінки реагуючих середовищ. Методи, реалізовані в цьому модулі, дозволяють моделювати поширення рідини й газу з урахуванням впливу явищ переносу;

– COMSOL STRUCTURAL MECHANICS MODULE – призначений для аналізу структурних деформацій компонентів і підсистем. Модуль містить спеціальні шаблони для моделювання каркасів, балок, плит і т.д.;

– COMSOL EARTH SCIENCE MODULE – призначений для моделювання процесів руху рідинних середовищ під землею. Даний модуль добре підходить для вивчення руху нафти й газу в пористих середовищах, ґрунтових вод і моделювання процесу поширення забруднень;

– COMSOL HEAT TRANSFER MODULE – дозволяє вирішувати задачі з будь-якою комбінацією основних способів теплопередачі:

провідності, конвекції й випромінювання. Використовується при проектуванні систем, у яких відбуваються інтенсивні процеси теплотворення й тепловіддачі;

– COMSOL MEMS Module – призначений для проектування в області мікроелектромеханіки. Використовуючи даний модуль, можна моделювати процеси, що відбуваються у пов'язаних приводах і сенсорах, а також у п'єзоелектричних приладах з мікропереміщенням частин та агрегатів;

– COMSOL Acoustics Module – призначений для моделювання акустичних явищ і створення моделей акустичного поширення в повітрі, воді, інших рідинах і твердих тілах;

– COMSOL RF Module – використовується при проектуванні радіопередавачів, мікрохвильових і оптичних приладів для розв'язку задач поширення радіочастотних і мікрохвиль, включаючи можливість застосування спеціальних анізотропних PML-шарів для моделювання відкритих електродинамічних систем;

– COMSOL Material Library – автоматизує процес завдання властивостей природних і штучних матеріалів у складних моделях. Містить властивості більше 2500 матеріалів. У бібліотеці представлені хімічні елементи, мінерали, гірські породи і т.д.;

– COMSOL AC/DC Module – призначений для моделювання конденсаторів, індукторів, електродвигунів, мікросенсорів і інших подібних пристроїв;

– COMSOL Reaction Engineering Lab – призначений для створення моделей хімічних систем з використанням формул хімічних реакцій;

– COMSOL Optimization Lab – містить набір сучасних алгоритмів для розв'язку задач оптимізації, що реалізують методи математичного програмування SNOPT і SQOPT.

1.1 Концепція методу кінцевих елементів

Основна ідея методу кінцевих елементів полягає в мінімізації функціонала варіаційної задачі на множині частинно-неперервних функцій, кожна з яких визначена на кінцевому числі підобластей. Частинно-неперервні функції визначаються за допомогою значень безперервної величини в кінцевому числі точок дослідної області.

У загальному випадку безперервна величина заздалегідь невідома, і потрібно визначити значення цієї величини в деяких внутрішніх точках області. Однак дискретну модель можна побудувати, якщо припустити, що числові значення цієї величини в кожній внутрішній точці області відомі. Для безперервної величини поступають у такий спосіб:

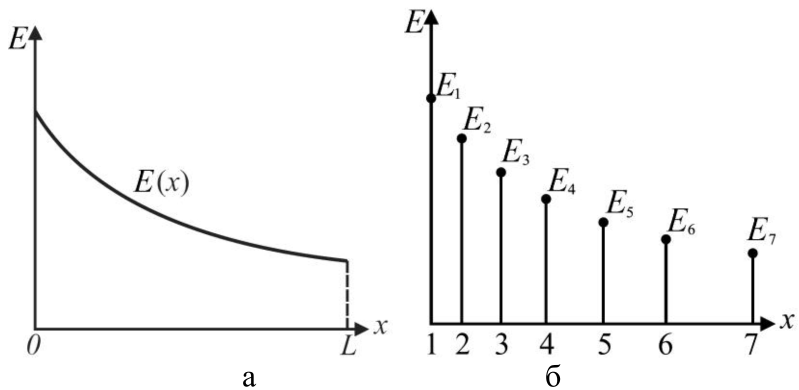
– у розглянутій області фіксується кінцеве число точок. Ці точки називаються вузловими точками, або вузлами;

– значення безперервної величини в кожній вузловій точці вважається змінною, яка повинна бути визначена;

– область визначення безперервної величини розділюється на кінцеве число підобластей, які називаються елементами. Ці елементи мають спільні вузлові точки і у сукупності апроксимують форму області;

– безперервна величина апроксимується на кожному елементі поліномом, який визначається за допомогою вузлових значень цієї величини. Для кожного елемента визначається свій поліном, але поліноми підбираються таким чином, щоб зберігалася безперервність величини уздовж границь елемента.

Розглянемо стандартний приклад розподілу напруженості $E(x)$ у стрижні довжини L (рис.1а). Задамо випадковим чином сім точок на осі x, яким відповідають деякі відомі значення $E(x)$ (рис. 1б), і будемо їх вважати їхніми вузлами.



а б

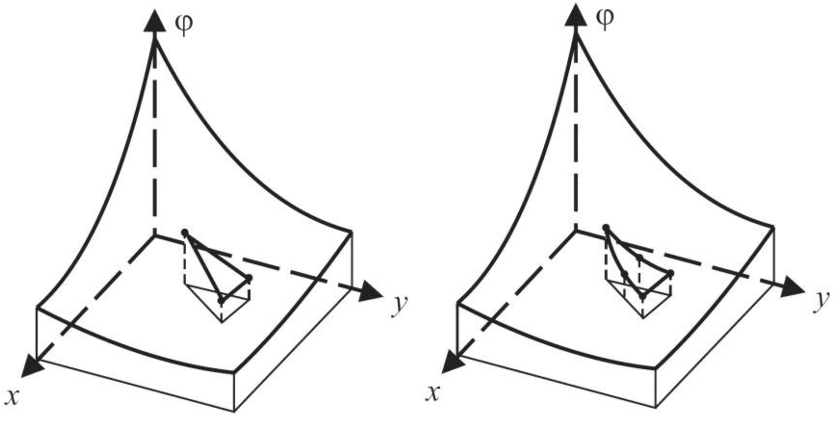
Рис. 1 Представлення розподілу напруженості в просторі: а – функцією, б – набором семи дискретних значень

Розділення області на елементи можна провести декількома способами: обмежити кожний елемент двома сусідніми вузловими точками, утворивши шість елементів, або розбити область на три елементи, кожний з яких містить три вузли, і т.д. Відповідний до елемента поліном визначається за значеннями $E(x)$ у вузлових точках елемента.

У випадку розділення області на шість елементів, коли на кожний елемент доводиться по два вузли, функція елемента лінійна по x, а апроксимація $E(x)$ складається із шести кусково-лінійних функцій, кожна з яких визначена на окремому елементі. У випадку розділення області на три елементи із трьома вузловими точками функції елемента можна представити у вигляді полінома другого ступеня, а апроксимація $E(x)$ буде складатися із сукупності двох кусково-неперервних квадратичних функцій.

Для знаходження розподілу напруженості в інших точках визначаються множина вузлів, а значення напруженості в цих вузлах є змінними, тому що вони заздалегідь невідомі. Область розділюється на елементи, на кожному з яких визначається відповідна функція елемента. Вузлові значення $E(x)$ регулюють таким чином, щоб забезпечувалося найкраще наближення до дійсного розподілу напруженості. Це регулювання здійснюється шляхом мінімізації деякої величини (функціонала), пов’язаної з фізичною задачею (диференціальним рівнянням).

Процес мінімізації зводиться до розв’язку системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносно вузлових значень $E(x)$. При побудові дискретної моделі безперервної величини, яка визначена в багатомірному випадку (у COMSOL одно-, двох і трьохмірному), основна концепція МКЕ використовується аналогічно, а в якості елементів використовуються функції від декількох змінних. Найбільш ефективний вибір елементів у двомірному випадку здійснюється при використанні форми трикутника або чотирикутника. Функції елементів стають плоскими поверхнями, якщо для даного елемента взяте мінімальне число вузлових точок (рис.2а), або криволінійними, якщо задано число вузлів більше мінімального (рис.2б). Надлишкове число вузлів дозволяє розглядати елементи із криволінійними границями. Остаточною апроксимацією двомірної безперервної величини буде служити сукупність кусково-неперервних поверхонь, кожна з яких визначається на окремому елементі за допомогою значень $\varphi(x,y)$ у відповідних вузлових точках.



а б

Рис. 2 Форми елементів розкладання: а – трикутний елемент із трьома вузлами, б – елемент із п'ятьма вузлами. Елемент із п'ятьма вузлами з більшою точністю повторює геометрію поверхні

Важливою особливістю МКЕ є можливість виділити з набору елемент, використання якого дозволило б визначати функцію елемента незалежно від його положення в загальній зв'язаній моделі і від інших функцій елементів. Визначення функції елемента через довільну множину вузлових значень і координат дозволяє використовувати функції елемента для апроксимації геометрії області.

1.2 Переваги і недоліки

Найбільш важливі переваги МКЕ:

– властивості матеріалів суміжних елементів не повинні бути обов'язково однаковими, що дозволяє застосовувати метод до об'єктів, складених з декількох матеріалів;

– криволінійна область може бути апроксимована за допомогою прямолінійних елементів або описана точно за допомогою криволінійних елементів, тобто, МКЕ можна використовувати для областей з будь-якою формою границі;

– розміри елементів можуть бути змінними, що дозволяє укрупнити або подрібнити сітку розбиття області на елементи й задавати змінну щільність розміщення елементів у мережі;

– МКЕ дозволяє розглядати граничні умови з розривним поверхневим навантаженням, а також змішані граничні умови;

– перераховані переваги МКЕ використовуються при складанні програм для розв’язку досить широкого класу задач.

До недоліків МКЕ відносять: штучне обмеження області розрахунків, дискретизацію навколишнього простору, необхідність виконання нової дискретизації при зміні положення елементів. Хоча ресурси вдосконалювання МКЕ практично вичерпані, ведеться оптимізація чисельних методів і програмних комплексів, які їх реалізують. Оптимізація спрямована на економію обчислювальних ресурсів і ефективність розв’язку різноманітних задач аналізу та проектування. Наприклад, створений комбінований метод кінцевих і граничних елементів (КМКіГЕ), який реалізує переваги МКЕ і не має його недоліків.

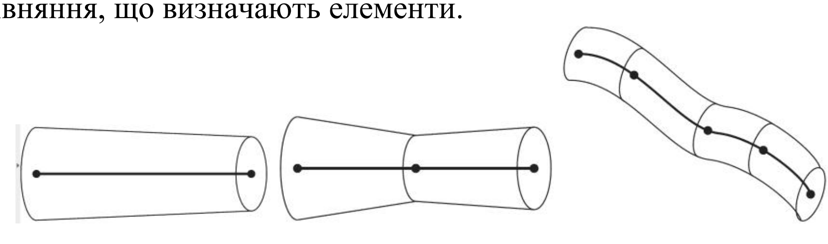
2 РОЗДІЛЕННЯ НА КІНЦЕВІ ЕЛЕМЕНТИ

Розділення області на підобласті носить творчий характер, отже, залежить від навичок. Неякісне розділення приводить до помилкових результатів, якщо навіть інші етапи методу здійснюються з достатньою точністю. Процедура дискретизації області складається із вибору числа, розмірів і форми підобластей, які використовуються для побудови дискретної моделі реального об’єкта. Елементи необхідно вибирати з достатньою точністю, тобто розмір елемента повинен залежати від збіжності задачі, тому потрібно мати деякі загальні уявлення про остаточні значення, для того щоб можна було зменшити розміри елементів у тих областях, де значення градієнтів велике, і збільшити їх там, де значення градієнтів близьке до нуля. Відзначимо, що в програмних комплексах типу COMSOL дискретизація області проводиться користувачем. Це обумовлене тим, що загального методу розділення на елементи в цей час не існує, і найбільш ефективний чинник розділення – це досвід користувача, що знає природу описуваного процесу.

2.1 Типи кінцевих елементів

Розглянемо часто використовувані типи кінцевих елементів, найпростішим з яких є одномірний елемент. Схематично він звичайно зображується у вигляді відрізка, хоча й має поперечний переріз, площу якого може змінюватися по довжині.

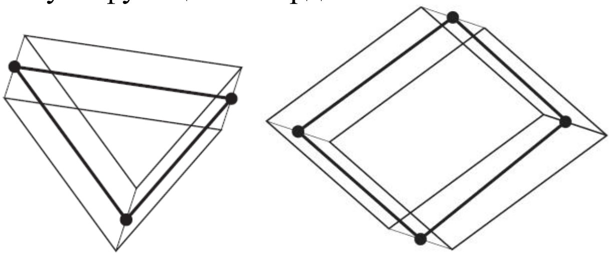
Найпростіший одномірний елемент має два вузли, по одному на кожному кінцю (рис.3а). Елементи більш високого порядку, трьохвузлові (квадратичні) (рис.3б) і четирьохвузлові (кубічні) (рис.3в) і т.д. Одномірний елемент може бути криволінійним (рис. 3в) за умови, що довжина дуги входить у рівняння, що визначають елементи.



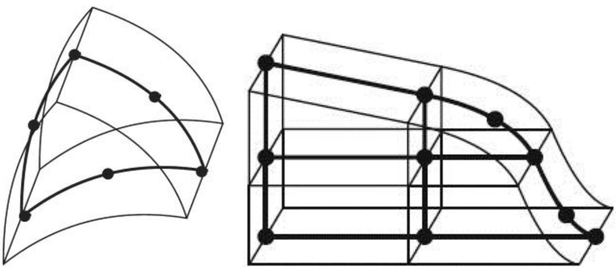
а б в

Рис. 3 Одномірні кінцеві елементи із двома, трьома й п’ятьма вузлами (а, б, в). Елементи із трьома й п’ятьма вузлами можна розглядати як кілька елементів із двома вузлами. Відзначимо, що кожному з вузлів можна додати вагу

Для дискретизації області у двомірному випадку найкраще себе зарекомендували два основні сімейства елементів: трикутники й чотирикутники. Сторони лінійних елементів кожного сімейства являють собою прямі лінії (рис.4а). Квадратичні й кубічні елементи можуть мати як прямолінійні, так і криволінійні сторони (рис.4б), а для моделювання криволінійних границь досить додати необхідне число вузлів у відповідні точки сторін елементів. Очевидно, що усередині області можна використовувати елементи з різних сімейств, якщо тільки вони мають однакову кількість вузлів на відповідних сторонах (рис.4в). Відзначимо, що товщина елемента може бути функцією координат.



а

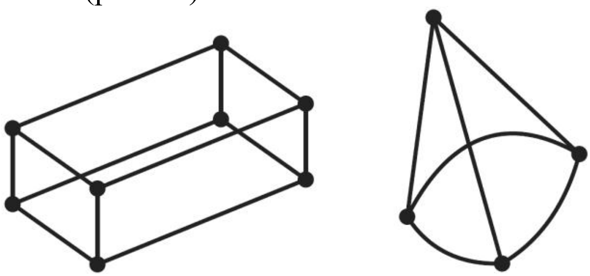


б в

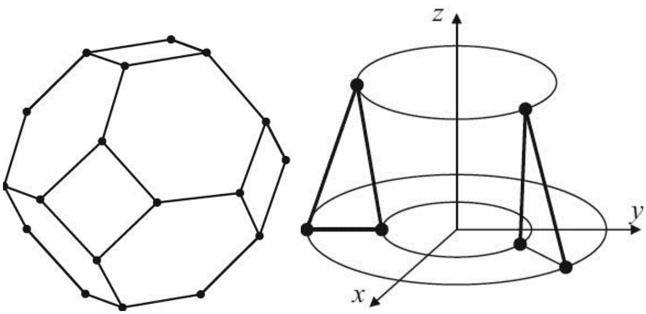
Рис. 4 Деякі найпростіші варіанти двомірних кінцевих елементів

У трьохмірному випадку елементами, що часто зустрічаються, є тетраедр і паралелепіпед (рис. 5а). В обох випадках лінійні елементи обмежені площинами, а елементи більш високого порядку у якості границь мають криволінійні поверхні.

При розділенні трьохмірного тіла важко наочно представити розташування елементів у дискретній моделі, тому, імовірно, більш бажаним елементом є паралелепіпед. Однак вочевидь, що при моделюванні задач, пов’язаних із кристалічними ґратами речовини, має сенс у якості елементів розглядати об’єкти, що є елементарними комірками кристалічних ґрат (рис. 5б). Також у випадку об’єктів з яскраво вираженими властивостями геометрії розглядають інші елементи. Наприклад, при розгляді тіл циліндричної форми використовуються елементи, подібні двомірному трикутнику, які дозволяють урахувати зміну невідомої величини уздовж третьої координати (рис. 5в).



а



б в

Рис. 5 Варіанти трьохмірних кінцевих елементів: а – найпростіші трьохмірні елементи, б – перша зона Бриллюена кубічної гранецентрованної ґратки, в – базовий елемент осесимметричних задач, який утворюється обертанням трикутника на кут 2π. Подібний елемент може бути отриманий обертанням чотирикутника

2.2 Розділення області на кінцеві елементи

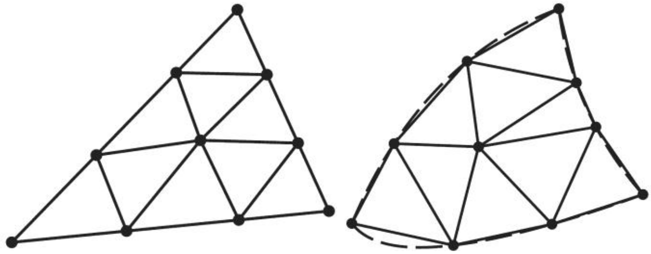
Процес дискретизації доцільно розділити на два етапи:

– розділення об'єкта на елементи;

– нумерація елементів і вузлів.

Дискретизація одномірного об'єкта зводиться до ділення відрізка на більш короткі відрізки, при цьому варіювати можна тільки кількість ділянок і їх розміри. Іноді, у відповідності із локалізацію процесів, які моделюються, ефективним виявляється ділення на ділянки різної довжини.

У двомірному випадку задача стає нетривіальною. Розглянемо розділення двомірної області на лінійні трикутні елементи. Трикутник – це найпростіший елемент із двомірних елементів у сенсі аналітичного описання, отже, при моделюванні області трикутниками можна використовувати найбільше число елементів. Будь-які інші елементи можна представити у вигляді комбінації трикутників, тому розділення області на трикутники – як правило, найкращий спосіб розділення. У більшості випадків розділення проводиться на чотирикутні й трикутні підобласті, або зони, які потім підрозділяються на трикутники. Стандартна процедура розділення полягає в наступному: вибирається визначене число вузлів уздовж кожної сторони і з'єднуються відповідні вузли прямими лініями, а точки перетинання цих ліній вважаються вузлами. Наприклад, показана на рис.6а трикутна зона, розбита на дев'ять елементів після розміщення чотирьох вузлів на кожній стороні. Вузли на сторонах зони можна розташовувати на різних відстанях, що дозволяє варіювати розміри елементів. У випадку криволінійної підобласті, границі її елементів заміняються на прямі відрізки (рис.6б). Число трикутних елементів у результаті розділення дорівнює $(n - 1)^2$, де n – кількість вузлів на стороні трикутної підобласті.



а б

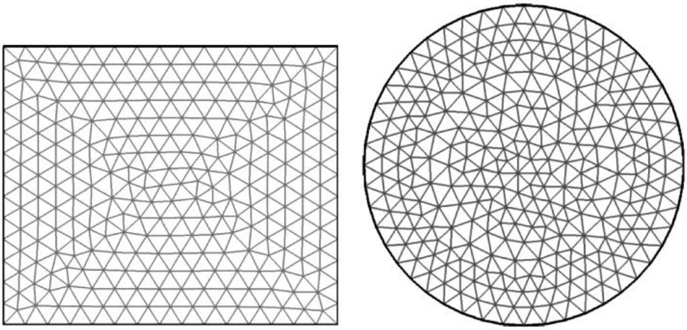
Рис. 6. Найпростіші варіанти розділення на кінцеві елементи. Штриховою лінією представлена початкова форма, а суцільними лініями зображені елементи

Відзначимо, що випадок розділення на чотирикутні елементи можна просто звести до розділення на трикутники. Для цього досить провести коротку діагональ у кожному внутрішньому чотирикутнику. Розділення з використанням короткої діагоналі переважно, тому що елементи, близькі за формою до рівностороннього трикутника, дозволяють отримати більш точні результати, ніж довгі вузькі трикутники.

Чотирикутні зони звичайно розділюють на елементи з’єднанням вузлів на протилежних сторонах. Число вузлів на суміжних сторонах чотирикутника може бути різним. Якщо мережа розділення подрібнюється або збільшується, то на протилежних сторонах може бути різне число вузлів. Відстань між граничними вузлами можна варіювати, щоб одержувати елементи різних розмірів. У чотирикутнику буде $2(n-1)(m-1)$ елементів, якщо на його суміжних сторонах фіксовано n і М вузлів.

Рівномірне розділення, коли всі елементи мають однакову форму і розміри, звичайно не проводиться, тому що існує концентрація напруг, температурні градієнти і т.д. У цьому випадках можливості варіювати розміри елемента в МКЕ дозволяє найбільш простим способом, застосовуючи чотирикутні підобласті з нерівним числом вузлів на протилежних сторонах, проводити процедуру дискретизації нерівномірно. Наприклад, розташувавши два вузли на одній стороні проти трьох вузлів на протилежній стороні. Проілюструємо застосування викладених ідей дискретизації за допомогою розділення моделі прямокутної і круглої областей в

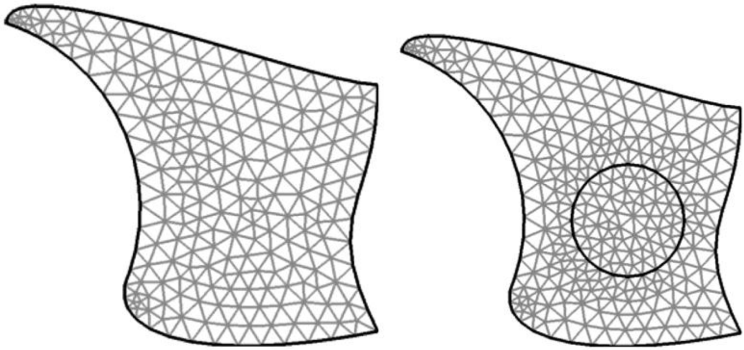
COMSOL Multiphysics (рис. 7).



а б

Рис. 7 Приклади розділення, коли спосіб розділення повторює геометрію фігури

Для збереження безперервності розглянутих об’єктів уздовж їх границі необхідно вибрати такі елементів, щоб трикутна й чотирикутна підобласті мали загальну границю. Число вузлів на границях для обох підобластей повинно бути однаковим, а відносне положення вузлів повинно збігатися. Відстані між вузлами уздовж границь чотирикутної зони змінюються так, щоб елементи поблизу криволінійної частини границі були малими (рис. 8). У багатьох задачах необхідно відзначити підобласті (вузли, напрямки, траєкторії і т.д.), які мають певні переваги над іншими. Границі між підобластями повинні проходити там, де змінюються геометрія, прикладене навантаження або властивості матеріалу. Як правило, у цих підобластях розділення необхідно сильно роздрібнити. Наприклад, на рис. 8б показане розділення області з урахуванням деякої особливості заданої в межах кола. У якості такої особливості може виступати сильний градієнт шуканої двомірної функції поблизу кола. Подібне розділення дозволяє з достатньою ефективністю й мінімумом витрат розрахункової потужності значно збільшити точність розрахунків.



а б

Рис. 8: а – розділення області з урахуванням її нетривіальної геометрії, тобто щільність кінцевих елементів в особливих областях вище, ніж в інших; б – штучним чином додана особливість у вигляді кола (така особливість може бути пов’язана з фізикою явища)

Багато фізичних задач не мають чітко встановлених границь області аналізу. Моделювання тіл, нескінченно протяжних в одному або декількох напрямках, являє собою певну задачу про граничні умови.

Друга частина процесу дискретизації (нумерація вузлів) впливає на ефективність обчислень. Використання методу кінцевих елементів приводить до задачі розв’язку системи великого числа лінійних алгебраїчних рівнянь. У більшості випадків матриця коефіцієнтів системи має вигляд S-діагональної матриці, тобто всі коефіцієнти, що не лежать на цих діагоналях, дорівнюють нулю. Правильна обчислювальна програма використовує тільки ненульові коефіцієнти матриці, тому найбільш ефективні способи розв’язку таких систем універсалізовані. Величезна перевага в тому, що на тепер дослідникам фізичних явищ не потрібно писати складні обчислювальні програми, тому що вони реалізовані в спеціалізованих програмних продуктах (у тому числі в COMSOL).

Для розв’язку задач МКЕ використовуються різноманітні елементи, і задача правильного розділення області залежить від структури системи, яка моделюється і процесів, які протікають у ній. Побудова геометрії і правильне розділення області дослідження є однією з основних проблем при використанні спеціалізованих програмних продуктів по чисельному моделюванню, а задача нумерації вузлів реалізована в цих програмах.

Ідеї, викладені для двомірної області в даному розділі, можуть бути узагальнені на випадок трьохмірного тіла.

3 ЗАДАЧА ІНТЕРПОЛЯЦІЇ

3.1 Інтерполяційні поліноми

Для апроксимації безперервної функції у МКЕ при дискретизації моделі самими поширеними функціями є поліноми. Вони будуються на множині кусково-безпереривних функцій, визначених на кінцевому числі підобластей, називаних елементами. Порядок полінома залежить від числа використовуваних у кожному вузлі елемента даних про безперервну функцію. Класифікація кінцевих елементів може бути проведена відповідно до порядку поліноміальних функцій цих елементів. При цьому розглядаються три наступні групи елементів: симплекс-, комплекс- і мультиплекс-елсменти.

Симплекс-елементам відповідають поліноми, які містять константу й лінійні члени, у яких число коефіцієнтів на одиницю більше розмірності координатного простору. Наприклад, поліном

$$\varphi = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y \tag{1}$$

являє собою симплексну функцію для двомірного трикутного елемента (рис.2а), є лінійним по x, y і містить три коефіцієнти, які визначаються з умов для вузлів трикутника.

Комплекс-елементи є розширенням класу симплекс-елементів. У них можуть бути присутніми не тільки лінійні складові, але й члени другого, третього й більш високого порядку.

Форма комплекс-елементів може бути такою ж, як і в симплекс-елементів, але комплекс-елементи мають додаткові граничні вузли й можуть мати внутрішні вузли. Головна відмінність між симплекс- і комплекс-елементами полягає в тому, що число вузлів у комплекс-елементі на одиницю більше величини розмірності координатного простору. Інтерполяційний поліном для двомірного трикутного комплекс-елемента (рис.2б) має вигляд

$$\left\{\begin{array}{l} \varphi = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y + \alpha_4 x^2 + \alpha_5 xy + \alpha_6 y^2 \\ F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6) = 0 \end{array}\right. \tag{2}$$

Це співвідношення включає п’ять незалежних коефіцієнтів, тому що розглянутий елемент повинен мати п’ять вузлів.

Мультиплекс-елементи також містять члени високого порядку, але границі елементів при цьому повинні бути паралельні координатним осям, що необхідно для досягнення безперервності при переході від одного елемента до іншого. Ця вимога є досить сильною, тому мультиплекс-елементи має сенс використовувати в сильно обмеженому колі задач.

Розглянемо одномірний симплекс-елемент, що представляє собою прямолінійний відрізок довжини L із двома вузлами (рис.9), і позначимо ці вузли індексами I і j, вузлові значення φ_I, і φ_j – відповідно.

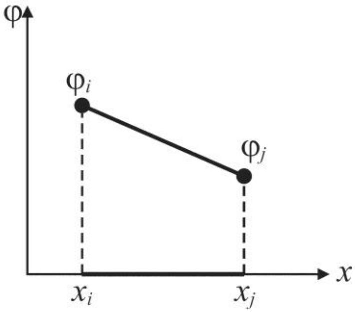


Рис. 9 Одномірний елемент із двома вузлами, який апроксимується найпростішим поліномом

Початок системи координат розташовується поза елементом. Поліноміальна функція φ має вигляд

$$\varphi = \alpha_1 + \alpha_2 x \ . \tag{3}$$

Використовуючи умови у вузлових точках $\varphi(x_i) = \varphi_i$ і $\varphi(x_j) = \varphi_j$, можна знайти коефіцієнти α_1 і α_2 :

$$\alpha_1 = (\varphi_i x_j - \varphi_j x_i)/L, \ \alpha_2 = (\varphi_j - \varphi_i)/L. \tag{4}$$

Підставляючи (4) в (3), одержимо

$$\varphi = \frac{(x_j - x)}{L}\varphi_i + \frac{(x - x_i)}{L}\varphi_j . \tag{5}$$

Лінійні функції від x в (5) називаються функціями форми, або інтерполяційними функціями. Кожна функція форми повинна бути позначена нижнім індексом для позначення вузла, до якого вона відноситься. Позначимо $N_i = (x_j - x)/L$ і

$N_j = (x_i - x)/L$, тоді вираз (5) буде мати вигляд

$$\varphi = N_i\varphi_i + N_j\varphi_j = N\Phi, \tag{6}$$

де $N = (N_i, N_j)$ – матричний рядок, $\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_i \\ \varphi_j \end{pmatrix}$ – вектор-стовпець.

Вочевидь, що функція N_i дорівнює одиниці у вузлі з номером I і дорівнює нулю у вузлі j, а функція N_j навпаки. Ці значення характерні для функцій форми. Вони дорівнюють одиниці в одному визначеному вузлі й обертаються у нуль в усі інших вузлах.

Як приклад двомірного симплекс-елемента виберемо трикутник із прямолінійними сторонами й трьома вузлами, по одному у кожній вершині (рис.10). Нумерацію вузлів елемента здійснимо послідовно проти годинникової стрілки, починаючи від деякого I-го вузла, який вибирається довільно.

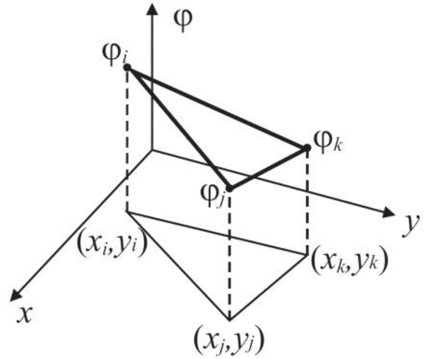


Рис. 10 Двомірний трикутний елемент із трьома вузлами. Вузлові значення скалярної величини φ позначені через φ_i, φ_j, і φ_k, а координатні пари (x_i, y_i), (x_j, y_j), (x_k, y_k)

Інтерполяційний поліном має вигляд

$$\varphi = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y \tag{7}$$

Використовуючи умови у вузлових точках $\varphi(x_i, y_i) = \varphi_i$, $\varphi(x_j, y_j) = \varphi_j$ і $\varphi(x_k, y_k) = \varphi_k$, можна знайти коефіцієнти α_1, α_2 і α_3 :

$$\alpha_1 = [(x_j y_k - x_k y_j)\varphi_i + (x_k y_i - x_i y_k)\varphi_j + (x_i y_j - x_j y_i)\varphi_k]/(2S),$$
$$\alpha_2 = [(y_j - y_k)\varphi_i + (y_k - y_i)\varphi_j + (y_i - y_j)\varphi_k]/(2S), \tag{8}$$
$$\alpha_1 = [(x_k - x_j)\varphi_i + (x_i - x_k)\varphi_j + (x_j - x_i)\varphi_k]/(2S),$$

де S – площа трикутника.

Проводячи процедуру, аналогічну одномірному випадку, одержимо елемент, що містить три функції форми:

$$\varphi = N_i \varphi_i + N_j \varphi_j + N_k \varphi_k = N\Phi, \tag{9}$$

де

$$N_i = [x_j y_k - x_k y_j + (y_i - y_k)x + (x_k - x_j)y]/(2S),$$
$$N_j = [x_k y_i - x_i y_k + (y_k - y_i)x + (x_i - x_j)y]/(2S),$$
$$N_k = [x_i y_j - x_j y_i + (y_i - y_j)x + (x_j - x_i)y]/(2S).$$

Тривіальні обчислення дають результат аналогічний одномірному випадку, функція N_i дорівнює одиниці у вузлі з номером I і дорівнює нулю в інших вузлах і у всіх точках прямої, проведеної через ці вузли.

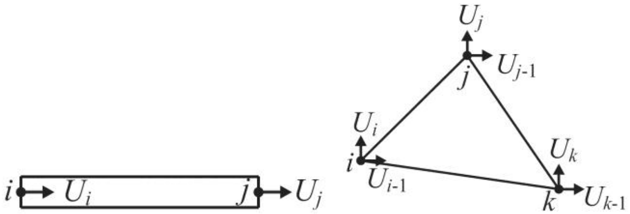
Скалярна величина φ визначається усередині елемента функціями форми, лінійними по *x* і *y*. Це означає, що необхідно використовувати дуже малі по величині елементи, щоб апроксимувати функцію φ, яка швидко змінюється.

Поширення на трьохмірний випадок здійснюється аналогічним чином.

3.2 Інтерполяція векторних величин

Інтерполяцію векторних величин проводять у такий спосіб: векторна величина представляється в алгебраїчній формі, тобто як набір компонентів, які розглядаються як невідомі скалярні величини. Кожний вузол містить *n* невідомих, де *n* – розмірність простору.

Позначення компонентів вектора, яке використовується проілюстроване для одно-, двох- і трьохмірного випадків на рис.11, де усе компоненти позначаються буквою *U*. Окремі компоненти різняться нижнім індексом, а числові значення нижніх індексів упорядковуються відповідно до напрямку компонентів вектора по осях *x*, *y*.



а б

Рис. 11 Позначення вузлових векторних величин, які використовуються в симплекс-елементах: а – одномірний елемент; б – двомірний елемент

В одномірній задачі представлення векторної величини усередині елемента збігається з представленням скалярної величини (6). У двомірному випадку при розгляді векторної величини маємо

$$\Phi = \begin{pmatrix} N_i\varphi_{2i\text{-}1} + N_j\varphi_{2j\text{-}1} + N_k\varphi_{2k\text{-}1} \\ N_i\varphi_{2i} + N_j\varphi_{2j} + N_k\varphi_{2k} \end{pmatrix} \qquad (10)$$

Вочевидь, що трьохмірний випадок є аналогічним.

Особливі властивості поліномів (3), (7) дозволяють використовувати їх для апроксимації велич усередині елемента. Вони дають правильні результати, коли вузлові значення розглянутих величин рівні між собою, і забезпечують безперервність у зонах між елементами.

Таким чином, збіжність розв’язку, отриманого методом кінцевих елементів, буде збільшуватися зі зменшенням розмірів елемента (якщо вузлові значення виявляються рівними між собою), коли інтерполяційні рівняння приводять до постійних значень розглянутих величин усередині елемента, а градієнти нескінченно малі. Необхідною умовою сталості значень розглянутих величин усередині елемента є

$$\sum_{\beta=1}^{n} N_\beta = 1, \qquad (11)$$

тобто, сума значень функцій форми повинна рівнятися одиниці у кожній внутрішній точці елемента. Тут n – число вузлів. Аналізуючи представлені вище симплекс-елементи, можна показати, що функції форми для цих елементів задовольняють умові (11), а градієнти прямують до нуля за асимптотою якщо задовольняється (11).

Дискретна модель для безперервної функції будується на множині кусково-неперервних функцій, кожна з яких, визначена на окремому елементі. Вочевидь, що інтеграл від функції, визначеної на кожному елементі, обмежений. Щоб інтеграл був обмежений на множині кусково-неперервних функцій, необхідно провести процедуру зшивання на границях кожного елемента. Ця процедура для відповідних поліномів має чітку структуру з наявністю алгоритму й реалізована в COMSOL. Алгоритм реалізації можна подивитися в "Help" і у зазначених там посиланнях.

3.3 Інтерполяційні поліноми для дискретизованної області

Особливістю МКЕ є те, що розміри елемента і його орієнтація можуть бути обрані так, як це зручно досліднику. Це дозволяє скласти загальні обчислювальні підпрограми, які включають різні елементи.

Розглянемо випадок скалярних величин. Поліном інтерполяції (9) можна представити в загальному вигляді

$$\phi^{(e)} = N\Phi = (N_1^{(e)}, N_2^{(e)}, ..., N_n^{(e)}) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \dots \\ \phi_n \end{pmatrix}, \qquad (12)$$

де n – число вузлів елемента, верхній індекс (e) означає довільний елемент.

Проілюструємо на прикладі простої п’ятиелементної конфігурації (рис.12), яким чином включається елемент у область, яка розглядається.

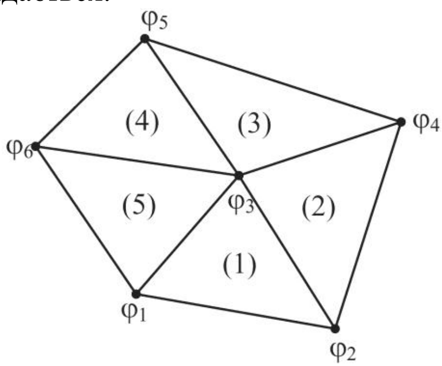


Рис. 12 Область, яка складається з п'яти кінцевих елементів

Вузли φ_1, φ_2, φ_3, φ_4, φ_5 і φ_6 є глобальними ступенями свободи, а їх координати вважаються відомими. Після елементарних операцій можна одержати наступну сукупність рівнянь для елементів:

$$\begin{aligned}
\varphi^{(1)} &= N_2^{(1)}\varphi_2 + N_3^{(1)}\varphi_3 + N_1^{(1)}\varphi_1,\\
\varphi^{(2)} &= N_3^{(2)}\varphi_3 + N_2^{(2)}\varphi_2 + N_4^{(2)}\varphi_4,\\
\varphi^{(3)} &= N_5^{(3)}\varphi_5 + N_3^{(3)}\varphi_3 + N_4^{(3)}\varphi_4,\\
\varphi^{(4)} &= N_6^{(4)}\varphi_6 + N_3^{(4)}\varphi_3 + N_5^{(4)}\varphi_5,\\
\varphi^{(5)} &= N_1^{(5)}\varphi_1 + N_3^{(5)}\varphi_3 + N_6^{(5)}\varphi_6.
\end{aligned} \tag{13}$$

Таким чином, за допомогою рівнянь (13) кінцеві елементи поєднуються в ансамбль, інтерполяційні функції виражаються через глобальні вузлові значення і глобальні координати, а рівняння (13) можна записати в матричній формі

$$\begin{pmatrix} \phi^{(1)} \\ \phi^{(2)} \\ \phi^{(3)} \\ \phi^{(4)} \\ \phi^{(5)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1^{(1)} & N_2^{(1)} & N_3^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & N_2^{(2)} & N_3^{(2)} & N_4^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & N_3^{(3)} & N_4^{(3)} & N_5^{(3)} & 0 \\ 0 & 0 & N_3^{(4)} & 0 & N_5^{(4)} & N_6^{(4)} \\ N_1^{(5)} & 0 & N_3^{(5)} & 0 & 0 & N_6^{(5)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \end{pmatrix} \tag{14}$$

Аналогічна ситуація існує для векторних величин з тією лише різницею, що у векторному випадку розмірність (14) збільшиться пропорційно розмірності вектора.

Описані вище методики і їх аналоги використовуються для закріплення елемента в каркасі тіла, що дає можливість апроксимувати скалярну або векторну величину кусково-неперервною функцією по всій області. Розуміння ідеї МКЕ необхідно для використання програмних продуктів типу COMSOL, тому що правильне поділення області моделювання може значно підвищити ефективність проведених розрахунків, а неправильне – може привести до помилкових результатів.

4 ПОЧАТОК РОБОТИ В COMSOL Multiphysics

4.1 Інтерфейс COMSOL Desktop

На рис.13 наведено знімок екрана COMSOL MULTIPHYSICS при першому запуску програми. COMSOL DESKTOP® – це комплексне інтегроване середовище для моделювання фізичних явищ і розробки додатків, в якій є все необхідне для створення зручного для користувача інтерфейсу для моделей дослідника. Робочий стіл гнучко настроюється. Вікна можна змінювати в розмірах, рухати, закріплювати і роз'єднувати. Всі зміни в макеті будуть збережені після завершення сеансу і знову відображаються під час наступного запуску COMSOL MULTIPHYSICS. У міру побудови моделі будуть додаватися нові вікна та віджети.

У число доступних вікон і елементів призначеного для користувача інтерфейсу входять:

– **Панель інструментів швидкого доступу**

Панель інструментів швидкого доступу містить такі функції, як Відкрити, Зберегти, Відмінити, Повторити, Копіювати, Вставити і Видалити. Набір інструментів можна налаштувати в списку панелі інструментів швидкого доступу (стрілка, яка дивиться вниз, праворуч від панелі інструментів).

– **Стрічка**

Стрічка в верхній частині робочого столу містить команди для виконання більшості операцій побудови і роботи з моделлю. Стрічка доступна тільки у версії середовища COMSOL DESKTOP для Windows®, а в версіях для OS X і Linux® замість неї використовуються меню і панелі інструментів. Щоб приступити до створення програми на основі моделі дослідника, просто натисніть кнопку СЕРЕДОВИЩЕ РОЗРОБКИ ДОДАТКІВ для переходу з КОНСТРУКТОРА МОДЕЛЕЙ в СЕРЕДОВИЩЕ РОЗРОБКИ.

– **Вікно налаштувань**

В цьому вікні задаються основні характеристики моделі, наприклад геометричні розміри об'єктів, властивості матеріалів, граничні і початкові умови, а також будь-яка інша інформація, яка може знадобиться для вирішення завдання.

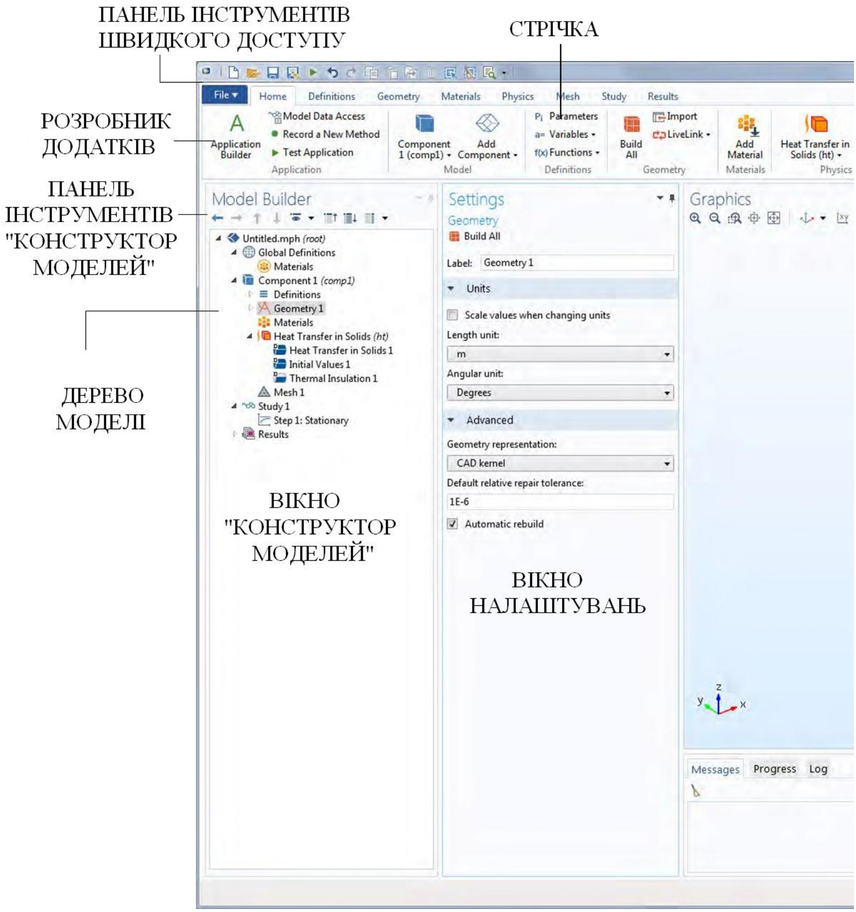


Рис. 13 Інтерфейс COMSOL MULTIPHYSICS при першому запуску програми (ліва сторона)

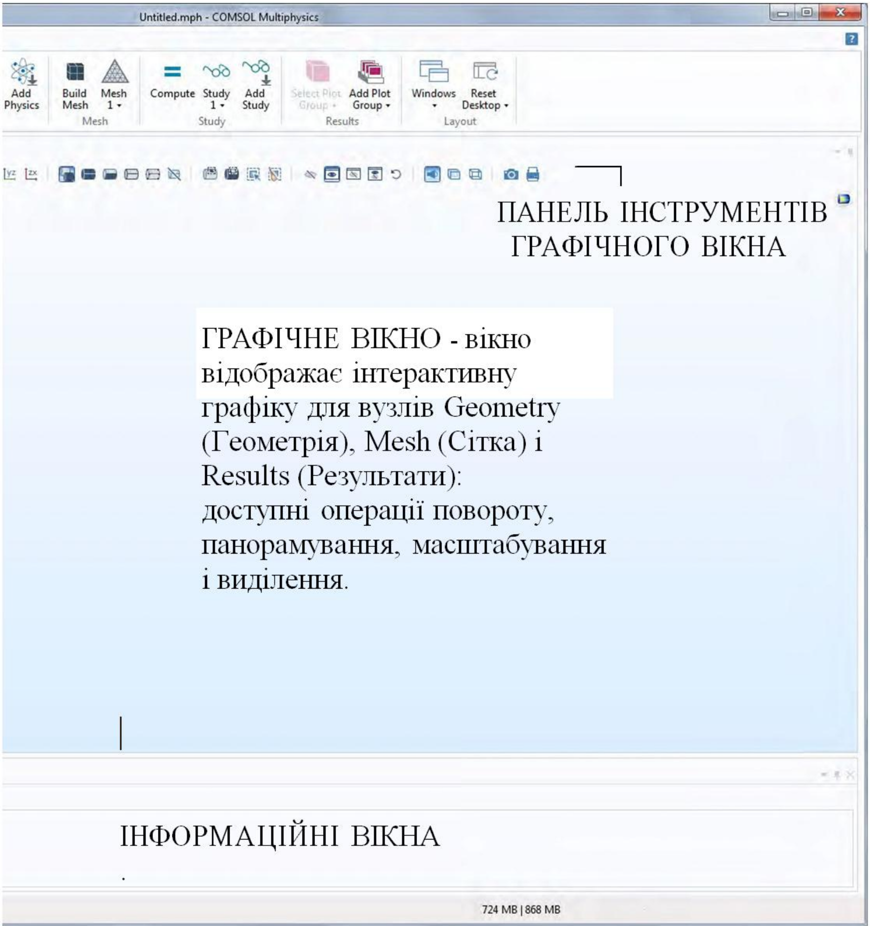


Рис. 13 Інтерфейс COMSOL MULTIPHYSICS при першому запуску програми (права сторона)

На рис.14 показано вікно SETTINGS (НАЛАШТУВАННЯ) вузла GEOMETRY (ГЕОМЕТРІЯ).

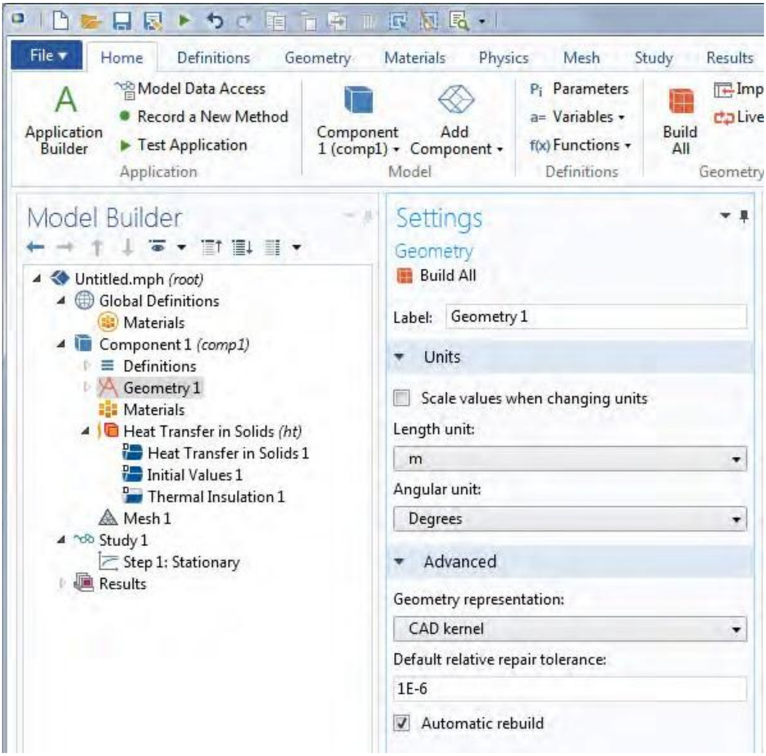


Рис.14 Вікно SETTINGS (НАЛАШТУВАННЯ) вузла GEOMETRY (ГЕОМЕТРІЯ)

– **Вікна графіків**

Вікна для виведення графічних даних. Як і ГРАФІЧНЕ ВІКНО, ВІКНА ГРАФІКІВ служать для візуалізації результатів. Для одночасного відображення декількох результатів можна використовувати кілька вікон графіків. Автоматично відображається спеціальне вікно CONVERGENCEPLOT (ГРАФІК ЗБІЖНОСТІ), призначене для графічного виведення **критерію** збіжності в процесі виконання завдання.

– **Інформаційні вікна**

Це вікна для виведення неграфічних даних. До них відносяться:

• **MESSAGES** (ПОВІДОМЛЕННЯ**)**: відображається різна інформація про поточний сеанс COMSOL.

• PROGRESS (ХІД ВИКОНАННЯ): доступні кнопки зупинки і інформація про хід вирішення.

• LOG (ЖУРНАЛ): відображаються такі дані, як число ступенів свободи, час рішення і відомості про ітераційний процес вирішення.

• TABLE (ТАБЛИЦЯ): числові дані в табличному форматі, який задається в розділі RESULTS (РЕЗУЛЬТАТИ).

• EXTERNALPROCESS (ЗОВНІШНІЙ ПРОЦЕС): панель управління кластерними, хмарними і пакетними завданнями.

– Інші вікна

• ADDMATERIAL (ДОДАТИ МАТЕРІАЛ) і MATERIAL BROWSER (БРАУЗЕР МАТЕРІАЛІВ): надає доступ до бібліотек властивостей матеріалів. БРАУЗЕР МАТЕРІАЛІВ дозволяє змінювати властивості матеріалів.

• SELECTIONLIST (СПИСОК ВИБОРУ): список об'єктів геометрії, областей, границь, граней і точок, які доступні для вибору в даний момент. Список, що випадає WINDOWS (ВІКНА) на вкладці стрічки HOME (ГОЛОВНА) дозволяє перемикатися між усіма вікнами COMSOL DESKTOP. В OS X і Linux® цей список знаходиться в меню WINDOWS (ВІКНА).

– Індикатор виконання з кнопкою CANCEL (СКАСУВАННЯ)

ІНДИКАТОР ВИКОНАННЯ з кнопкою для скасування поточного обчислення, якщо воно запущено, розташований у правому нижньому кутку інтерфейсу COMSOL DESKTOP.

– Динамічна довідка

Вікно HELP (ДОВІДКА) відображає контекстну довідку про відкриті вікна і вибраних вузлах дерева моделі. Після запуску (наприклад, клавішею F1) вікно HELP (ДОВІДКА) відображає динамічну довідку (тільки англійською мовою) для обраного користувачем вузла або вікна. У вікні HELP (ДОВІДКА) можна також шукати відомості з інших тем, наприклад за назвою пункту меню.

4.2 Конструктор моделей та Розробник додатків

Два основних компоненти середовища COMSOL DESKTOP – КОНСТРУКТОР МОДЕЛЕЙ і РОЗРОБНИК ДОДАТКІВ (APPLICATION BUILDER).

Конструктор моделей – це інструмент для опису моделі та її компонентів: алгоритму рішення, аналізу результатів і звітів. Для конструювання будується дерево моделі. Дерево моделі відповідає структурі даних моделі – модельному об'єкту, в якому зберігається стан моделі, включаючи налаштування геометрії, сітки, фізики, граничних умов, досліджень, вірішувачів, постобрабки і відображення результатів.

Розробник додатків (Application Builder) дозволяє швидко створити додаток зі зручним в роботі призначеним для користувача інтерфейсом. Додаток ґрунтується на моделі, створеній в Конструктор моделей. Розробник додатків містить два важливих інструмента створення додатків – Редактор форм і Редактор методів. Також додаток може містити меню в формі панелі або стрічки. У Редакторі форм за допомогою перетягування можна легко додавати такі компоненти користувальницького інтерфейсу, як поля введення, графічні вікна і кнопки. Редактор методів – це середовище програмування, яке дозволяє працювати з моделлю на базі об'єктно-орієнтованого представлення даних. Редактор методів також може використовуватися для програмування алгоритму роботи інтерфейсу користувача і додаткового функціоналу. Для написання коду в Редакторі методів використовується мова програмування Java®,

Даний посібник містить докладні відомості, необхідні для початку роботи з Будівнику моделей, а також короткі відомості про початок роботи з Розробником додатків. Робота з Розробником додатків, включаючи Редактор форм і Редактор методів, докладно описана в керівництві "Введення в Розробник додатків" (Introduction to Application Builder) [ ].

4.3 Запуск додатків і COMSOL Server

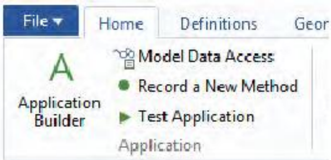
Розробник додатків включено у версію COMSOL Multiphysics для Windows®. При наявності ліцензії COMSOL Multiphysics користувач може запускати додатки в середовищі COMSOL Desktop. Незважаючи на те, що програми не можуть бути створені у версіях програмного забезпечення для OS X або Linux®, їх можна запустити на цих платформах за допомогою COMSOL Multiphysics.

При наявності ліцензії COMSOL SERVER додатки можна запускати з поширених веб-браузерів у різних операційних системах і апаратних платформах. Крім того, додатки можна запускати, підключившись до COMSOL SERVER за допомогою простого в установці клієнта COMSOL CLIENT FOR WINDOWS®.

Клієнт COMSOL CLIENT FOR WINDOWS® дозволяє користувачеві запускати додатки, для яких необхідний модуль LiveLink ™ для САПР (функція буде недоступна, якщо програму запущено через веб-браузер).

Запуск додатків в веб-браузері не вимагає установки додатків або наявності модулів для веб-браузера. Запущені в веб-браузері програми підтримують одномірну, двомірну і трьохмірну інтерактивну графіку. Трьохмірна графіка в веб-браузері відображається за допомогою технології WebGL ™, доступної в усіх поширених веб-браузерах.

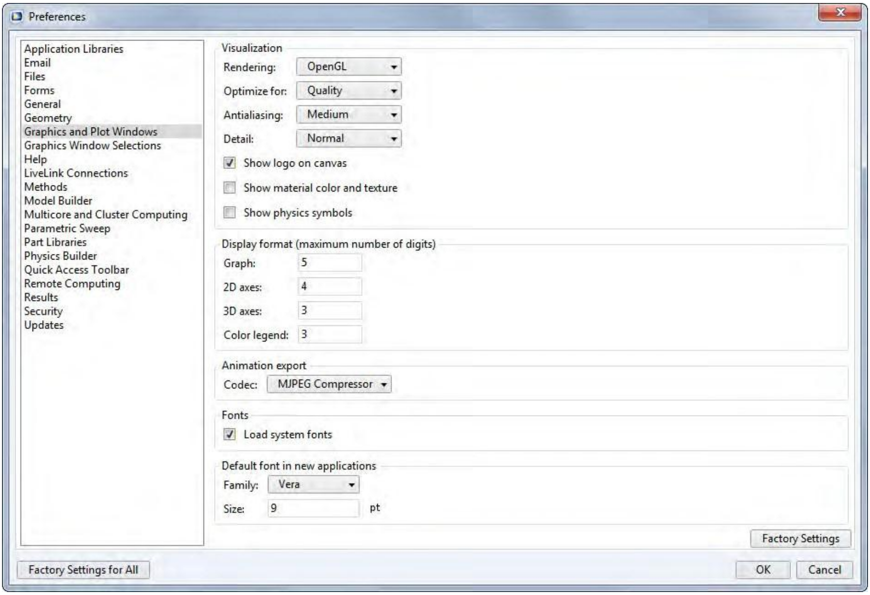
Щоб створити додаток на основі моделі, запустіть РОЗРОБНИК ДОДАТКІВ (APPLICATION BUILDER) на вкладці стрічки HOME (ГОЛОВНА).



Додаткова інформація про створення додатків в системі COMSOL приведена в розділі «Створення програми» далі і в керівництві "Введення в Розробник додатків" (Introduction to Application Builder).

4.4 Preferences (Параметри)

Параметри – це призначені для користувача налаштування середовища моделювання. Більшість з них застосовуються до всіх сеансів моделювання, але деякі зберігаються прямо в моделі. Вікно PREFERENCES (ПАРАМЕТРИ) можна викликати з меню FILE (ФАЙЛ) натисканням на кнопку PREFERENCES (ПАРАМЕТРИ).



У вікні PREFERENCES (ПАРАМЕТРИ) можна змінювати такі налаштування, як режим побудови графіки, кількість знаків в числових результатах, максимальне число ядер ЦП для виконання обчислень, а також шляхи до призначених для користувача бібліотек додатків. Перегляньте поточні налаштування, щоб вивчити можливі варіанти.

Доступні три режими побудови графіки: OpenGL®, DiRectX® і SoftwaRe Rendering (Програмна побудова). Режим DiRectX® недоступний в OS X і Linux®. Для застосування в Windows® необхідно, щоб бібліотеки DiRectX® були встановлені разом з COMSOL. Якщо на комп'ютері немає дискретної відеокарти, може знадобитися перемикання в режим SoftwaRe Rendering (Програмна побудова), який працює повільніше, проте підтримує всі графічні можливості. Список рекомендованих відеокарт наведено тут:

www.comsol.ru/system-RequiRements

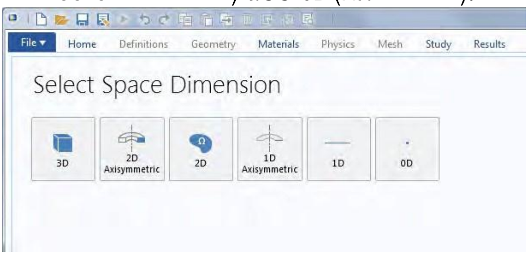
4.5 Створення нової моделі

Ви можете створити модель за допомогою НАВІГАТОРА МОДЕЛЕЙ (MODEL WIZARD) або на основі шаблону ПОРОЖНЬОЇ МОДЕЛІ (BLANK MODEL).

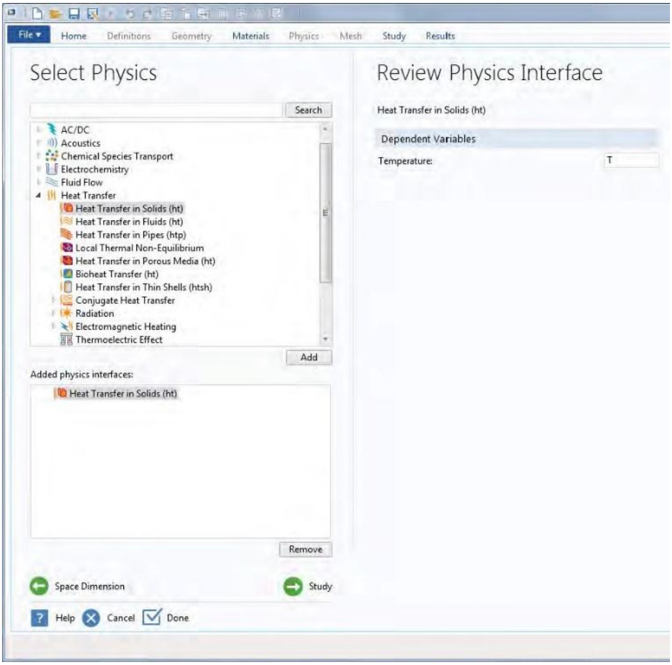
4.5.1 Створення моделі за допомогою Навігатора моделей (Model Wizard)

НАВІГАТОР МОДЕЛЕЙ (MODEL WIZARD) допоможе вам задати розмірність простору, фізику і тип дослідження всього за кілька дій:

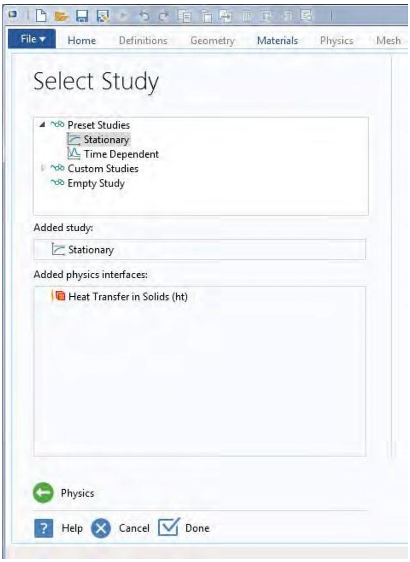
1. Виберіть розмірність простору для компонента моделі: 3D (ТРЬОХМІРНИЙ), 2D AXISYMMETRIC (ДВОМІРНИЙ ОСЕСИМЕТРИЧНИЙ), 2D (ДВОМІРНИЙ),1D AXISYMMETRIC (ОДНОМІРНИЙ ОСЕСИМЕТРИЧНИЙ) або 0D (НУЛЬМІРНИЙ).



2. Додайте один або кілька інтерфейсів фізики. Для зручності пошуку вони згруповані за розділами фізики. При додаванні продуктів в COMSOL Multiphysics додаткові інтерфейси фізик можуть з'явитися відразу в декількох розділах.



3. Виберіть тип дослідження, що відповідає одному або декільком розв'язувачам, які будуть використовуватися при обчисленнях.



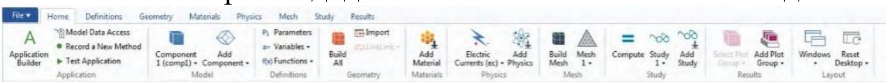
4. Натисніть DONE (ГОТОВО). На робочому столі з'явиться дерево моделі з урахуванням тих налаштувань, які були задані в НАВІГАТОРІ МОДЕЛЕЙ (MODEL WIZARD).

4.5.2 Створення моделі на основі шаблону

Щоб відкрити інтерфейс COMSOL DESKTOP без компонентів і досліджень, натисніть кнопку BLANK MODEL (ПОРОЖНЯ МОДЕЛЬ). Для додавання компонента певної просторової розмірності, інтерфейсу фізик або дослідження необхідно натиснути правою кнопкою миші в дереві моделі.

4.6 Стрічка і панель інструментів швидкого доступу

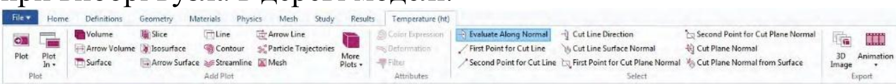
Вкладки стрічки COMSOL DESKTOP, які відображають процес моделювання і функціональність, доступну на кожному етапі, включаючи створення додатків на базі ваших власних моделей.



На вкладці HOME (ГОЛОВНА) розташовані кнопки найчастіших операцій для зміни моделей, запуску моделювання, а також побудови та тестування додатків. Серед цих операцій – зміна параметрів моделі для параметризрваної геометрії, додавання матеріалів і інтерфейсів фізик, побудова сітки, проведення дослідження і візуалізація результатів моделювання.

Для всіх основних етапів процесу моделювання є стандартні вкладки. Вони впорядковані зліва направо з урахуванням порядку дій: DEFINITIONS (ВИЗНАЧЕННЯ), GEOMETRY (ГЕОМЕТРІЯ), MATERIALS (МАТЕРІАЛИ), PHYSICS (ФІЗИКИ), MESH (СІТКА), STUDY (ДОСЛІДЖЕННЯ) і RESULTS (РЕЗУЛЬТАТИ).

Контекстні вкладки відображаються, тільки коли це необхідно, – наприклад, вкладка 3D PLOT GROUP (ГРУПА 3D ГРАФІКІВ) доступна тільки при додаванні відповідної групи графіків або при виборі вузла в дереві моделі.



Модальні вкладки використовуються для особливих операцій, коли інші можливості стрічки часово не потрібні. Прикладом може служити модальна вкладка Work Plane (Робоча площина). При використанні робочих площин інші вкладки не відображаються, оскільки не містять потрібних операцій.

Порівняння Стрічки і Конструтора моделей

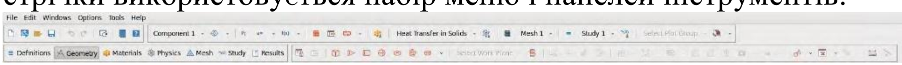
Стрічка надає швидкий доступ до команд і доповнює дерево моделі у вікні Model Builder (Конструтор моделей). Більшість можливостей Стрічки також доступні з контекстних меню по правому кліку миші в вузлах дерева моделі. Однак деякі операції, наприклад, вибір вікна COMSOL Desktop, доступні тільки в Стрічці. В інтерфейсі COMSOL Desktop для OS X і Linux® ці функції знаходяться на панелях інструментів, які замінюють собою Стрічку на цих платформах. Також є операції, доступні тільки в дереві моделі, наприклад, перепорядкування і відключення вузлів.

Панель інструментів швидкого доступу

Панель інструментів швидкого доступу містить набір команд, які не залежать від інформації, вкладки Стрічки. Панель інструментів швидкого доступу можна налаштовувати: додати на неї більшість команд з меню File (Файл), включаючи команди відміни і затримки недавніх дій, а також команд копіювання, вставки, дублювання і видалення вузлів дерева моделі. Крім того, користувач може розмістити Панель інструментів швидкого доступу над Стрічкою або під нею.

OS X і LINUX™

У середовищі COMSOL Desktop для OS X і Linux® замість стрічки використовується набір меню і панелей інструментів:



Інструкції у цьому керівництві засновані на версії середовища COMSOL DESKTOP для Windows®. Однак ПО COMSOL MULTIPHYSICS і середовище COMSOL DESKTOP запускаютьсяв OS X і Linux® майже так само, за винятком того, що елементи інтерфейсу СТРІЧКИ знаходяться у відповідних меню і на панелях інструментів.

4.7 Конструктор моделей і дерево моделі

Конструктор моделей – це інструмент для завдання параметрів моделі та її компонентів: алгоритму рішення, аналізу результатів і звітів. Для цього будується дерево моделі.

Побудовамоделі починається зі стандартного дерева моделі, в яке ви можете додавати вузли і міняти їх налаштування.

Всі вузли в дереві моделі за замовчуванням є батьківськими вузлами верхнього рівня. Для додавання і перегляду списку доданих дочірніх вузлів, або подсистемами, клацніть правою кнопкою миші відповідний вузол. Саме таким чином вузли додаються в дерево.

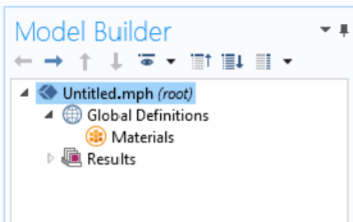
При натисканні на дочірньому вузлу відкриваються його налаштування в вікні SETTINGS (НАЛАШТУВАННЯ). Саме тут налаштування вузла.

Важливо відзначити, що коли відкрито вікно **Help** (**Довідка**) (за допомогою пункту **Help** (**Довідка**) в меню **File** (**Файл**) або клавіші F1), користувач може отримати динамічну довідку (тільки англійською мовою), клацнувши будь-який вузол.

Вузли ROOT (КОРІННИЙ), GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) і RESULTS (РЕЗУЛЬТАТИ)

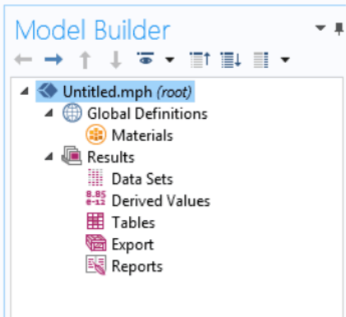
У дерева моделі завжди є кореневий вузол (на початку називається UNTITLED.MPH), а також вузли GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) і RESULTS (РЕЗУЛЬТАТИ).

Ім'я кореневого вузла – це ім'я файлу мультифізичної моделі, або MPH-файлу, в якому зберігається ця модель. В налаштуваннях кореневого вузла вказані ім'я автора, система одиниць вимірювання за замовчуванням і інші параметри.



За замовчуванням в вузлі GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) є підвузол MATERIALS (МАТЕРІАЛИ). Вузол GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) потрібен для завдання параметрів, змінних, функцій і зв'язків, які можуть використовуватися в дереві моделі. Їх можна застосовувати, наприклад, для визначення значень і функціональних залежностей властивостей матеріалів, сил, геометрії та інших елементів. Сам по собі вузол GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) не має налаштувань, але їх багато у його дочірніх вузлах. У вузлі GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) > MATERIALS (МАТЕРІАЛИ) зберігаються властивості матеріалів, на які можна посилатися в вузлах COMPONENT (КОМПОНЕНТ) моделі.

Вузол RESULTS (РЕЗУЛЬТАТИ) містить рішення, отримане після моделювання, а також інструменти для обробки даних. Спочатку вузол RESULTS (РЕЗУЛЬТАТИ) складається з п'яти підсистем:



• DATA SETS (НАБОРИ ДАНИХ) містять список доступних користувачеві рішень.

• DERIVED VALUES (ПОХІДНІ ВЕЛИЧИНИ) можна отримати на основі рішення, використовуючи інструменти постобробки.

• TABLES (ТАБЛИЦІ) зручні для відображення похідних величин або результатів роботи датчиків, які у реальному часі відстежують хід рішення при моделюванні.

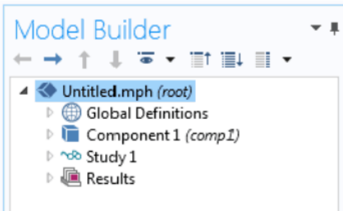
• EXPORT (ЕКСПОРТ) дозволяє вибрати числові дані, зображення та анімацію для експорту у файли.

• REPORTS (ЗВІТИ) автоматично створені або призначені для користувача звіти про моделі в форматі HTML або Microsoft® Word®.

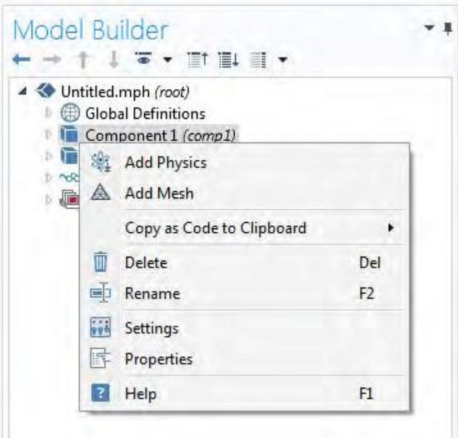
До цих п'яти підвузлів можна додати підвузли PLOT GROUP (ГРУПА ГРАФІКІВ), що задають графіки, які відображаються в графічному вікні або в ВІКНАХ ГРАФІКІВ. Деякі графіки створюються автоматично в залежності від виду моделювання, але ви також можете додати додаткові графіки – для цього потрібно натиснути правою кнопкою миші на вузлі RESULTS (РЕЗУЛЬТАТИ) і вибрати тип графіка зі списку.

Вузли COMPONENT (КОМПОНЕНТ) і STUDY (ДОСЛІД)

Крім трьох описаних вузлів є ще два додаткових типи вузлів верхнього рівня: Вузли COMPONENT (КОМПОНЕНТ) і STUDY (ДОСЛІДЖЕННЯ). Зазвичай їх створює НАВІГАТОРА МОДЕЛЕЙ при додаванні нової моделі. Після того, як в НАВІГАТОРІ МОДЕЛЕЙ обраний тип фізики моделі і тип дослідження (наприклад, стаціонарне, залежне від часу, частотної області або аналіз власної частоти), він автоматично створює по одному вузлу кожного типу і відображає їх вміст.



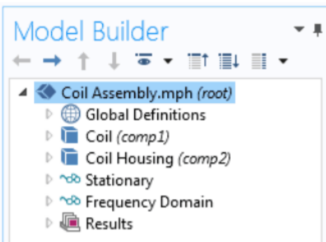
При розробці моделі можна додати додаткові вузли COMPONENT (КОМПОНЕНТ) і STUDY (ДОСЛІДЖЕННЯ). Так як в моделі може бути кілька вузлів COMPONENT (КОМПОНЕНТ) і STUDY (ДОСЛІДЖЕННЯ), у них повинні бути різні імена. Тому ці типи вузлів слід перейменувати з урахуванням їх індивідуального призначення.



Якщо у моделі кілька вузлів COMPONENT (КОМПОНЕНТ), їх можна зв'язати для отримання більш складної послідовності моделювання.

Важливо відзначити, що вузол STUDY (ДОСЛІДЖЕННЯ) може виконувати різні типи обчислень, тому у кожного такого вузла є своя кнопка COMPUTE (ОБЧИСЛИТИ) **=**.

Для прикладу припустимо, що потрібно побудувати модель котушки в зборі, що складається з двох частин – власне котушки і її корпусу. Створимо два вузла COMPONENT (КОМПОНЕНТ) – один для котушки і один для корпусу. Присвоїмо кожному вузлу назву з урахуванням імені об'єкта. Аналогічно створимо два вузла STUDY (ДОСЛІДЖЕННЯ): перший буде моделювати постійну, або стаціонарну, поведінку збірки, а другий – її частотну характеристику. Назовемо ці два вузли STATIONARY (СТАЦІОНАРНЕ) і FREQUENCY DOMAIN (ЧАСТОТНА ОБЛАСТЬ) відповідно (можна використовувати назви українською). Коли модель буде готова, збережемо її в файл під назвою COIL ASSEMBLY.MPH. На ілюстрації нижче показано, як виглядає дерево моделі в КОНСТРУКТОРІ МОДЕЛЕЙ на даному етапі.



На цій ілюстрації кореневий вузол називається COIL ASSEMBLY.MPH – так само, як і файл, в якому зберігається модель. Вузлам GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) і RESULTS (РЕЗУЛЬТАТИ) присвоєні імена за замовчуванням. Крім того, тут є два вузла COMPONENT (КОМПОНЕНТ) і два вузла STUDY (ДОСЛІДЖЕННЯ), імена яких були обрані в попередньому підрозділі.

4.8 Параметри, змінні і області їх дії

Глобальні параметри

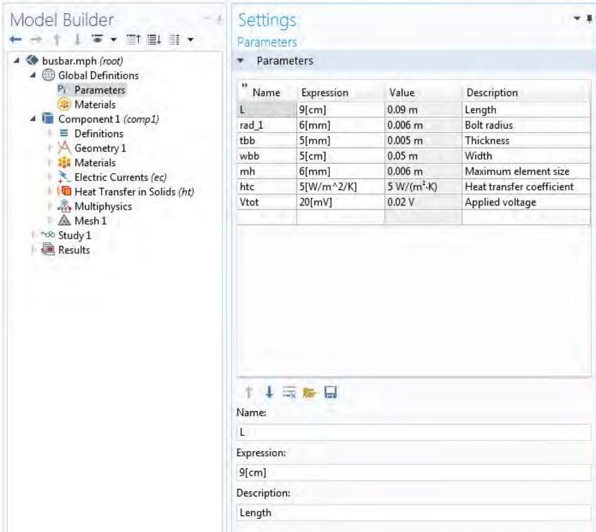
Глобальні параметри – це скалярні константи, які доступні у всіх елементах моделі. Типові варіанти застосування:

• параметризаціїягеометричних розмірів.

• визначення розмірів елементів сітки.

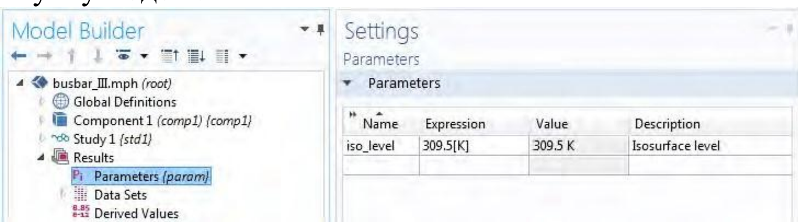
• визначення параметричного дослідження - моделювання, при якому змінюється велике число значень якого-небудь параметра – наприклад, частоти або навантаження.

Вираз глобального параметра може містити числа, параметри, вбудовані константи, вбудовані функції з глобальними параметрами в якості аргументів, а також унарні і бінарні оператори. Список доступних операторів наведено в «Додаток С. Елементи мови та зарезервовані імена». Так як ці вирази оцінюються до запуску моделювання, глобальні параметри не можуть залежати від змінної часу *t*, а також від просторових координат *x*, *y*, *z* та інших змінних, відносно яких вирішуються рівняння в моделі. Важливо пам'ятати, що імена параметрів чутливі до регістру. Глобальні параметри задаються в дереві моделі GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) в вузлі PARAMETERS (ПАРАМЕТРИ).



Параметри результатів

Для більшої гнучкості існує можливість задавати параметри, які використовуються тільки в вузлі Results (Результати). Використання цих параметрів не вимагає перерахунку моделі.



Параметри результатів можуть залежати від інших параметрів результатів, але не від глобальних параметрів.

Змінні

Змінні задаються або в вузлі Global Definitions (Глобальні визначення), або в підвузли Definitions (Визначення) вузла Component (Компонент). Як правило, вибір місця для оголошення змінної залежить від того, чи повинна змінна бути глобальною (доступною в усіх елементах дерева моделі) або локальної (доступно тільки в одному вузлі COMPONENT (КОМПОНЕНТ)). Як і вираз параметра, вираз змінної може містити числа, параметри, вбудовані константи, а також унарні і бінарні оператори. Однак в ньому вже можуть бути такі змінні, як *t*, *x*, *y* або *z*, функції з виразами для змінної як аргумент, а також змінні, відносно яких вирішується рівняння, і їх часові та просторові похідні.

Змінні, які використовуються в додатках

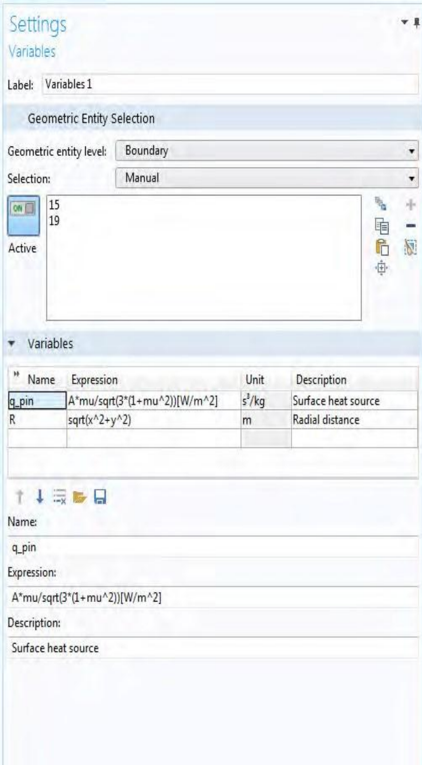
Параметри і змінні можна використовувати в додатках і змінювати їх значення. Крім того, змінні для використання в додатках задаються в СЕРЕДОВИЩІ РОЗРОБКИ ДОДАТКІВ у вузлі DECLARATIONS (ОГОЛОШЕННЯ).

Область дії

«Область дії» параметра або змінної вказує, де цей параметр або змінну можна використовувати у виразах. Всі параметри задаються в вузлі GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) дерева моделі як підвузол PARAMETERS (ПАРАМЕТРИ). Це означає, що у них глобальна область дії і що їх можна використовувати в будь-якому елементі дерева моделі.

Змінні теж можна оголосити в вузлі GLOBAL DEFINITIONS (ГЛОБАЛЬНІ ВИЗНАЧЕННЯ) як під вузол VARIABLES (ЗМІННІ) і призначити їм глобальну область дії, але для них діють інші обмеження. Наприклад, змінні можна використовувати в вузлах GEOMETRY (ГЕОМЕТРІЯ), MESH (СІТКА) і STUDY (ДОСЛІДЖЕННЯ), крім випадків, коли змінна фігурує у вираженні, яке задає умову зупинки моделювання.

Змінна, оголошена у підвузлі DEFINITIONS (ВИЗНАЧЕННЯ) вузла COMPONENT (КОМПОНЕНТ), має локальну область дії і може використовуватися тільки в цьому вузлі COMPONENT (КОМПОНЕНТ), але не у вузлах GEOMETRY (ГЕОМЕТРІЯ) або MESH (СІТКА). Їх можна використовувати, наприклад, для завдання властивостей матеріалу у підвузлі MATERIALS (МАТЕРІАЛИ) вузла COMPONENT (КОМПОНЕНТ) або для визначення граничних умов і взаємодій. Іноді має сенс обмежити область дії змінної до певної частини геометрії – наприклад, до окремих границь. Для цього в налаштуваннях змінної можна вказати, чи визначена вона для всієї геометрії вузла Component (Компонент) або тільки для окремих областей, границь, граней або точок.



На ілюстрації оголошені дві змінні, `q_pin` і `R`, область дії яких обмежена всього до двох границь з номерами 15 і 19.

Таке обмеження називається Selection (Вибіркою), і таким вибіркам можна присвоїти ім'я і потім ссилатись на них в будь-якому місці моделі. Це може бути корисним, наприклад, при завданні властивостей матеріалу або граничних умов, в яких буде використовуватися змінна, але тільки в рамках певних меж. Щоб привласнити ім'я вибірці, натисніть кнопку CReate Selection (Створити вибірку) () праворуч від списку вибірок.

Хоча змінні, які оголошені в вузлі Variables (Змінні) підвузла Definitions (Визначення) вузла Component (Компонент), мають локальну область дії, до них можна звертатися і за межами вузла Component (Компонент) в дереві моделі, якщо досить точно вказати їх імена. Для цього служить «точкова нотація», в якій перед ім'ям змінної через точку вказується ім'я вузла Component (Компонент), де вона оголошена. Іншими словами, якщо у вузлі COMPONENT (КОМПОНЕНТ) під назвою `MyModel` оголошена змінна `foo`, то до неї можна звернутися за межами цього вузла за допомогою конструкції `MyModel.foo`. Це зручно, коли змінна потрібна для побудови графіків в вузлі RESULTS (РЕЗУЛЬТАТИ). Змінні, оголошені в вузлі DECLARATIONS (ОГОЛОШЕННЯ) СЕРЕДОВИЩА РОЗРОБКИ ДОДАТКІВ, доступні у всіх об'єктах і методах форм, але не можуть використовуватися у КОНСТРУКТОРІ МОДЕЛЕЙ.

4.9 Вбудовані константи, змінні і функції

У COMSOL MULTIPHYSICS вбудовано безліч констант, змінних і функцій. Їх імена зарезервовані і тому недоступні для перевизначення. При спробі привласнити змінної користувача, параметру або функції зарезервоване ім'я система виділить введений текст помаранчевим (попередження) або червоним (помилка) кольором, а при виборі цього текстового рядка відобразить підказку.

Типові варіанти застосування:

– Математичні константи, такі як `pi` (3,14 ...) і уявна одиниця `i` або `j`.

– Фізичні константи, такі як `g_const` (прискорення вільного падіння), `c_const` (швидкість світла) і `R_const` (універсальна газова постійна).

– Змінна часів `t`.

– Похідні першого та другого порядків від шуканих змінних (рішення), імена яких походять від назв просторових координат і інших шуканих змінних, заданих користувачем.

– математичное функції, такі як `cos`, `sin`, `exp`, `log`, `log10` і `sqrt`.

Додаткову інформацію див. у «Додаток С. Елементи мови і зарезервовані імена».

На рисунку нижче показаний приклад налаштованого робочого столу з додатковими вікнами.

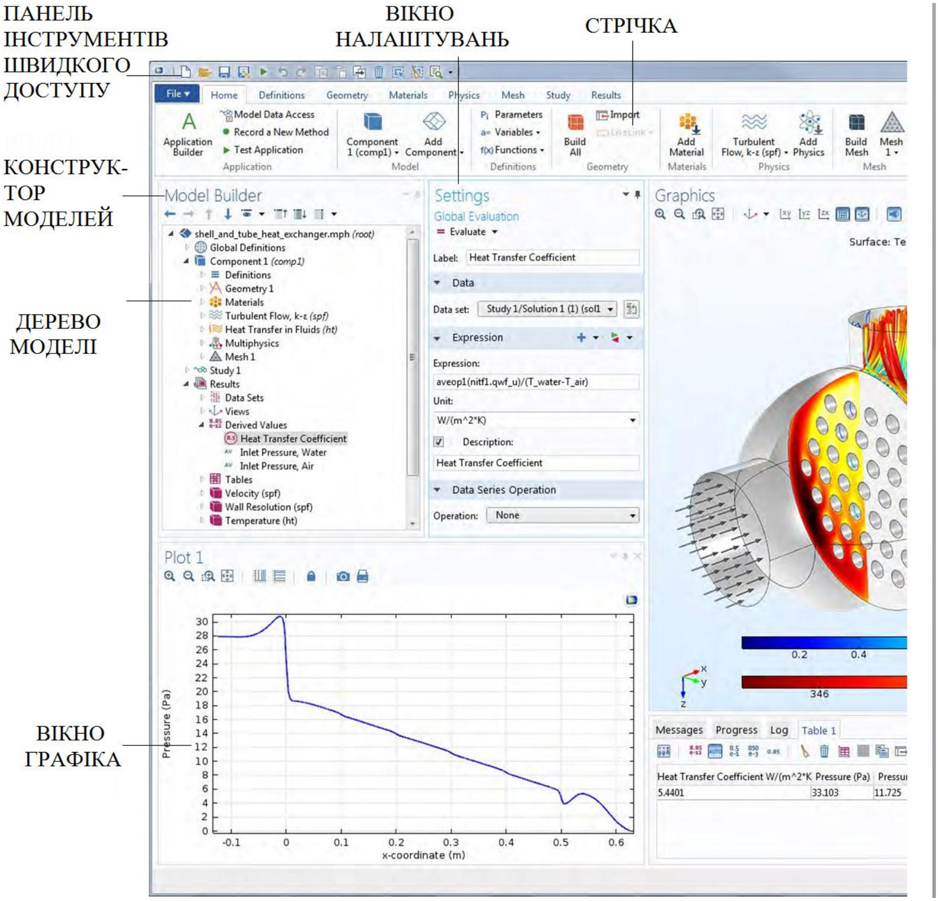


Рис. 13 Інтерфейс налаштованого робочого столу з додатковими вікнами (ліва сторона)

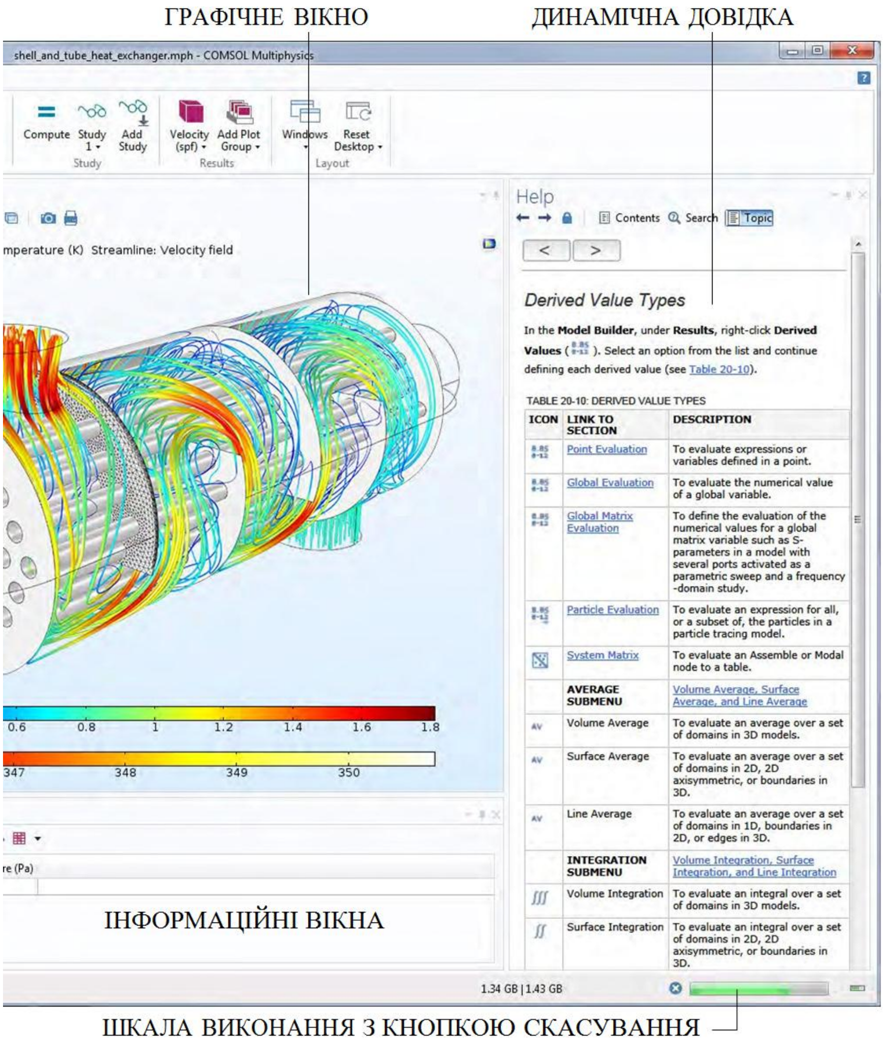
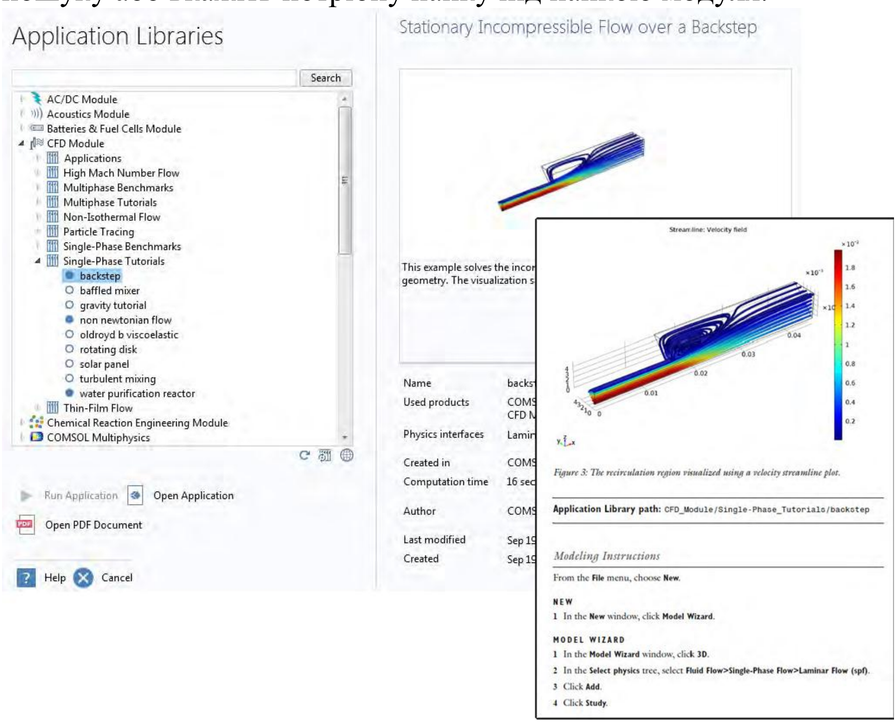


Рис. 13 Інтерфейс налаштованого робочого столу з додатковими вікнами (права сторона)

4.10 Бібліотеки додатків

Бібліотеки додатків (Application Libraries) – це набори mph-файлів, що містять навчальні моделі і готові до роботи додатка із супровідною документацією. В документацію до навчальних моделей входить теоретична частина і покрокові інструкції. Для готових додатків є докладні інструкції по роботі з ними. Користувачі можуть вивчати і змінювати навчальні моделі і додатки з урахуванням власних потреб. У кожного модуля для тієї чи іншої фізики є своя бібліотека додатків з прикладами з відповідного розділу фізики. Покрокові інструкції і mph-файли можна застосовувати як шаблони для створення власних моделей.

Щоб відкрити вікно Бібліотеки додатків, виберіть Application Libraries (Бібліотеки додатків) в меню Windows (Вікна) на панелі інструментів Home (Головна) або через меню File (Файл) > Application Libraries (Бібліотеки додатків) і знайдіть потрібну програму в полі пошуку або вкажіть потрібну папку під папкою модуля.



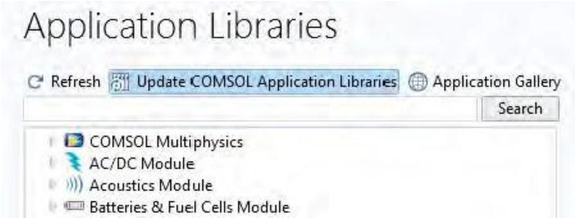
Виберіть OPEN APPLICATION (ВІДКРИТТЯ ПРОГРАМИ), RUN APPLICATION (ЗАПУСТИТИ ПРОГРАМУ) або OPEN PDF DOCUMENT (ВІДКРИТИ PDF-ДОКУМЕНТ). Щоб знайти додаток на ім'я або вказати модуль, можна також вибрати FILE (ФАЙЛ) > HELP (ДОВІДКА) > DOCUMENTATION (ДОКУМЕНТАЦІЯ) через меню FILE (ФАЙЛ) в інтерфейсі COMSOL MULTIPHYSICS.

У БІБЛІОТЕЦІ ДОДАТКІВ mph-файли бувають двох форматів – повні і компактні mph-файли:

– Повні mph-файли, що містять всі сітки та рішення. Такі файли відображаються у вікні БІБЛІОТЕК ДОДАТКІВ із позначкою , А для готових до запуску додатків – із позначкою. Якщо розмір mph-файлу перевищує 25 МБ, при виборі вузла моделі в дереві БІБЛІОТЕК ДОДАТКІВ відображається підказка з текстом `Large file (Великий файл)` і розміром файлу.

– Компактні mph-файли, які містять всі налаштування моделі, але без сіток і даних рішення. З їх допомогою можна вивчати налаштування, а також будувати сітки і перераховувати рішення. Крім того, при оновленні БІБЛІОТЕКИ ДОДАТКІВ можна завантажити повні версії більшості цих файлів з усіма сітками і рішеннями. Такі файли відображаються у вікні БІБЛІОТЕК ДОДАТКІВ із позначкою, а готові до запуску додатки –позначкою. При наведенні курсора на компактний файл у вікні БІБЛІОТЕКИ ДОДАТКІВ з'являється повідомлення `No Solutions StoRed (Не містить рішень)`. Якщо доступний для завантаження повний Mph-файл, в контекстному меню відповідного вузла відображається пункт DOWNLOAD FILE WITH SOLUTIONS (ЗАВАНТАЖИТИ ФАЙЛ З РІШЕННЯМИ) .

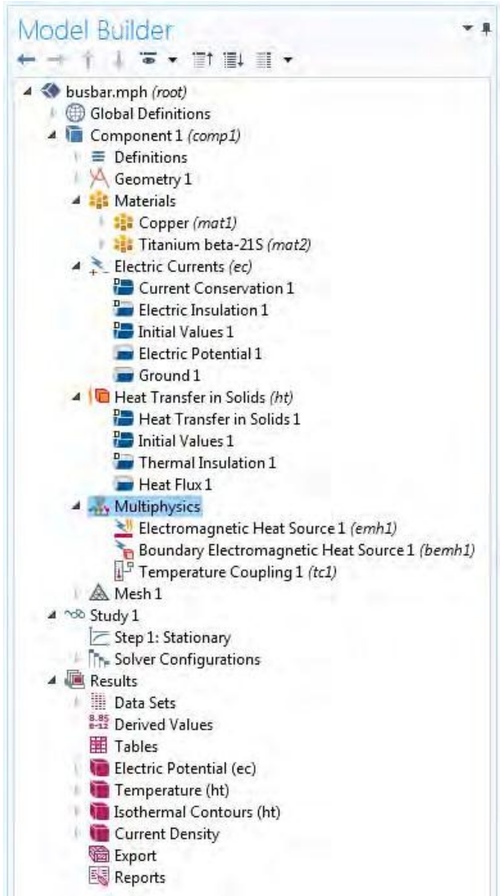
COMSOL регулярно оновлює БІБЛІОТЕКИ ДОДАТКІВ. Щоб перевірити всі доступні оновлення, виберіть пункт UPDATE COMSOL APPLICATION LIBRARY (ОНОВИТИ БІБЛІОТЕКУ ДОДАТКІВ COMSOL) вгорі вікна APPLICATION LIBRARIES (БІБЛІОТЕКИ ДОДАТКІВ). Також ця функція доступна в меню FILE (ФАЙЛ) > HELP (ДОПОМОГА) (для користувачів Windows®) або в меню HELP (ДОПОМОГА) (Для користувачів OS X і Linux®). Далі відкриється веб-сайт COMSOL, на якому можна вибрати нові додатки і останні оновлення для завантаження.



Якщо ваш комп'ютер має доступ в інтернет, ви можете натиснути кнопку APPLICATION GALLERY (ГАЛЕРЕЯ ДОДАТКІВ), щоб отримати доступ до великої кількості додаткових прикладів на сайті COMSOL.

4.11 Робочий процес і послідовність операцій

У вікні КОНСТРУКТОРА МОДЕЛЕЙ кожен етап процесу моделювання – від оголошення глобальних змінних до створення звіту з результатами – відображається в дереві моделі.



Всі операції в дереві моделі виконуються по порядку – зверху вниз.

У наступних розділах дерева моделі враховується порядковий номер вузла, тому для зміни послідовності операцій можна переміщати підвузли вгору або вниз:

– Геометрія.

– Матеріали.

– Фізика.

– Сітка.

– Дослідження.

– Групи графіків.

У розділі Component Definitions (Визначення для компонента) дерева моделі також враховується порядок вузлів наступних типів:

– Ідеально узгоджений шар.

– Нескінченні елементи.

Змінити порядок вузлів можна за допомогою таких дій:

– перетягнути їх мишею (Drag-and-drop).

– натиснути правою кнопкою миші на вузол і вибрати Move Up (Зрушити вгору) або Move Down (Зрушити вниз).

– натиснути Ctrl+ стрілка вгору або Ctrl+ стрілка вниз.

В інших розділах при виконанні операцій порядок вузлів не враховується, проте для зручності деякі вузли можна переміщати. Одним із прикладів є дочірні вузли в вузлі Global Definitions (Глобальні визначення).

Щоб переглянути послідовність операцій у вигляді програмного коду, збережіть модель як Файл моделі для MATLAB® або як Файл моделі для Java®, попередньо обравши Compact History (Компактний журнал) в меню File (Файл). В журналі моделі ведеться облік всіх змін, внесених в модель при її побудові. Відповідно, в журналі вказані і всі виправлення, в тому числі зміни параметрів, граничних умов і методів вирішувача. При вмиканні компактного режиму з журналу видаляються всі перевизначені зміни і залишаються тільки останні, які дійсні для моделі.

При роботі з інтерфейсом COMSOL Desktop і Конструктора моделей ви оціните їх просту і систематизовану організацію. Однак ніякий опис інтерфейсу не замінить реальної роботи з ним. Тому найбільш ефективно ретельно вивчити приклади, щоб отримати загальне уявлення про систему моделювання.

5 МАТЕМАТИЧНЕ ОПИСАННЯ ПРОЦЕСІВ

5.1 Основна форма диференційного рівнянням

Як відзначалося, тип моделі можна вибрати в НАВІГАТОРІ МОДЕЛЕЙ (MODEL WIZARD). Розробниками передбачене моделювання не більш ніж у трьохмірному просторі. Цей вибір цілком зрозумілий у силу того, що майже всі фізичні моделі, які використовуються на практиці, мають розмірність не більш трьох. У COMSOL MULTIPHYSICS є можливість вибрати шаблон процесу або математичного рівняння для описання процесу в моделі, що цікавить дослідника. В загальному випадку процеси в трьохмірному розгляді описуються диференційним рівнянням основної форми (General Form PDE):

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla\Gamma = f \; . \tag{15}$$

Нагадаємо, що моделювання процесів в COMSOL MULTIPHYSICS можна здійснювати за допомогою комбінацій декількох фізик (шаблонів) або систем рівнянь. Для цього досить додати шаблон, який при виборі з'явиться у вікні SELECTED PHYSICS. Якщо необхідно розв'язати систему рівнянь із одного шаблону, то досить задати число шуканих функцій за допомогою параметра NUMBER OF DEVELOPMENT VARIABLES. Третім етапом MODEL WIZARD є вибір різновиду процесу.

COMSOL MULTIPHYSICS, крім наведеного математичного модуля (MATHEMATICS) включає більше 40 модулів для вирішення різних фізичних задач. Назви цих модулів характеризують наукові й інженерні напрямки, для яких в COMSOL MULTIPHYSICS реалізовані відповідні моделі.

5.2 Диференціальні рівняння в частинних похідних (PDE)

На прикладі рівняння (15) легко проілюструвати особливості завдання параметрів моделей у COMSOL MULTIPHYSICS і різноманітних обмежень, які накладаються на ці моделі.

Рівняння (15) в COMSOL MULTIPHYSICS вважається матричним рівнянням, і його можна переписати із застосуванням індексів у наступному вигляді:

$$\sum_{j=1}^{n}\left\{e_a^{ij}\frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2}+d_a^{ij}\frac{\partial u_j}{\partial t}\right\}+\sum_{k=1}^{s}\frac{\partial}{\partial x^{k}}\Gamma^{ik}=f^i \quad (16)$$

Тут I, j = 1, 2, ..., n, де n – кількість шуканих функцій, і відповідно, і кількість рівнянь; u_j – елемент шуканого вектора u, f^i – елемент вектора f, який задається, e_a^{ij}, d_a^{ij} – матричні елементи квадратних матриць e_a і d_a відповідно, що мають розмірність $n \times n$. Співвідношення $\sum_{k=1}^{s}\frac{\partial}{\partial x^k}\Gamma^{ik}$ є скалярним добутком S-мірного градієнта й деякої матриці Г розмірності $n \times s$. Значення S вибирається на першому етапі в MODEL WIZARD і є розмірністю досліджуваного фізичного простору.

Вочевидь, що змоделювати абсолютно довільне рівняння не можливо, тому в COMSOL MULTIPHYSICS передбачається, що параметри e_a^{ij}, d_a^{ij}, f^i І Γ^{ik} можуть бути тільки деякими функціями координат, часу, шуканих функцій, перших і других похідних від шуканих функцій і інтегралами від них і не можуть залежати від похідних більш високого порядку в явному вигляді. Введення залежностей від похідних більш високого порядку значно ускладнило б реалізацію програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS, однак, використовуючи математичні закони, рівняння з похідними порядку n можна представити у вигляді системи рівнянь порядку менше n. Отже, COMSOL MULTIPHYSICS дозволяє проводити чисельне моделювання багатомірних нелінійних інтегродиференціальних рівнянь порядку n.

5.3 Особливості завдання параметрів

Архітектура завдання змінних, функцій і т.д. в COMSOL MULTIPHYSICS еволюціонувала із системи MATLAB [5].

Приведемо базові особливості завдання параметрів, які прийняті за замовчуванням в COMSOL MULTIPHYSICS, і які необхідно знати, щоб досить ефективно проводити моделювання фізичних процесів.

– Символи t, x, y, z використовуються в якості змінних для позначення часу й просторових координат, причому кожна із цих змінних є набором дійсних чисел, вbзначених у моделі. Наприклад, можна задати функцію (множина значень функції в точках, де визначені значення *x*) у вигляді (*x*>0), що в математичному записі еквівалентно $f(x) = \begin{cases} 1, x > 0, \\ 0, x \le 0. \end{cases}$

– Символи *u*, *u*1, *u*2 і т.д., як правило, використовуються для позначення функцій у моделі (можливе використання інших символів), а додавання праворуч до символів *u*, *u*1, *u*2 і т.д. символу змінної означає похідну по даній змінній (в COMSOL MULTIPHYSICS таке позначення використовується для похідних першого й другого порядку). Наприклад, *uxx* – друга часткова похідна від функції *u* по змінній *x*, *uxt* – змішана похідна другого порядку від функції *u* по змінним *x* і *t*.

Інші особливості завдання параметрів e_a^{ij}, d_a^{ij}, f^i І Γ^{ik} і т.д. виконуються за допомогою визначення змінних, тобто за допомогою введення Matlab-виразів.

5.4 Вибір різновиду процесу, який моделюється шаблоном

Процес чисельного моделювання в COMSOL MULTIPHYSICS має ієрархічну структуру й ділиться на кілька типів дослідження, які можна вибирати в MODEL WIZARD. Вибір якогось із типів дослідження у ДЕРЕВІ МОДЕЛІ (STUDIES TREE) створює автоматично розділ у КОНСТРУКТОРІ МОДЕЛЕЙ (MODEL BUILDER). У вікні SELECT STUDY TYPE відображаються тільки типи процесів, які можна реалізувати для шаблону, обраного у вікні ADD PHYSICS НАВІГАТОРА МОДЕЛЕЙ (MODEL WIZARD), причому в SELECT STUDY TYPE існують підрозділи:

– PRESET STUDIES – типи дослідження, задані шаблоном фізики (або інтерфейсом математики) у вікні ADD PHYSICS, якщо був обраний тільки один шаблон;

– PRESET STUDIES FOR SELECTED PHYSICS – типи дослідження, задані шаблоном фізики (або інтерфейсом математики) у вікні ADD PHYSICS, якщо було обрано кілька шаблонів;

– CUSTOM STUDIES – містить типи дослідження, не властиві для шаблонів, обраних у вікні ADD PHYSICS.

4.5. Конструктор моделей (Model Builder)

Керування процедурою моделювання проводиться через Конструктор моделей (Model Builder). Model Builder включає дерево об’єктів з усією функціональністю і операціями для конструювання фізичних або математичних моделей, чисельного моделювання, аналізу й представлення результатів. У якості базових об’єктів конструктора моделей виступають:

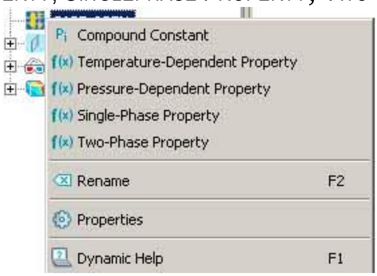
– Global Definition – призначений для визначення глобальних змінних, параметрів, функцій і т.д., які можна використовувати при конструюванні в будь-якому місці побудованої моделі;

– Model – призначений для створення основної моделі, що включає підпункти геометрії, матеріалів, розділення на кінцеві елементи, шаблон моделі і т.д. Відзначимо, що в одному файлі може бути визначено кілька моделей;

– Study – тут настроюються параметри ітераційних процедур, конфігурації вирішувачів і т.д.;

– Results – призначений для представлення і аналізу результатів;

– Cape-open – дозволяє настроїти функції для власних обчислень: Compound Constant, Temperature Dependent Property, Pressure Dependent Property, Singlephase Property, Two-Phase Property.



– меню Cape-open

У кожного із цих пунктів можуть бути створені підпункти, які необхідні для моделювання.

5.6 Завдання до розділу

1) Використовуючи Model Wizard, створити модель:

а) нестаціонарного одномірного рівняння в часткових похідних;

б) стаціонарного одномірного рівняння в часткових похідних;

в) одномірного рівняння в часткових похідних для розв’язку задачі на власні значення;

г) системи трьох нестаціонарних одномірних рівнянь у часткових похідних;

д) системи трьох рівнянь: нестаціонарного одномірного рівняння в часткових похідних, стаціонарного одномірного рівняння в часткових похідних і одномірного рівняння в часткових похідних для розв’язку задачі на власні значення;

е) нестаціонарного двомірного рівняння в часткових похідних;

ж) системи двох нестаціонарні двомірні рівнянь у часткових похідних;

з) системи чотирьох рівнянь: нестаціонарного одномірного рівняння в часткових похідних, нестаціонарного двомірного рівняння в часткових похідних, стаціонарного двомірного рівняння в часткових похідних і одномірного рівняння в часткових похідних для розв’язку задачі на власні значення;

і) стаціонарного трьохмірного рівняння в часткових похідних;

к) системи двох стаціонарних трьохмірних рівнянь у часткових похідних;

л) системи трьох рівнянь: нестаціонарного одномірного рівняння в часткових похідних, стаціонарного двомірного рівняння в часткових похідних, нестаціонарного трьохмірного рівняння в часткових похідних;

м) нестаціонарного одномірного рівняння в часткових похідних у полярній системі координат.

2) Використовуючи MODEL WIZARD, створити:

а) двомірну модель електростатичного поля у циліндричній системі координат;

б) трьохмірну модель теплопередачі, включаючи провідність, конвекцію;

в) одномірну модель теплопередачі в тонких структурах;

г) двомірну модель акустичного стисливого потоку;

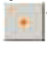
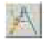
д) двомірну модель системи, яка складається з електростатичного поля й теплопередачі в тонких структурах.

6 ПОБУДОВА РОЗРАХУНКОВОЇ ОБЛАСТІ

Розрахунковою областю, або геометрією об'єкта, є модель фізичної конструкції, для якої проводиться чисельне моделювання. Сконструювати геометричну область або намалювати модель фізичного об'єкта можна з використанням вбудованих в COMSOL MULTIPHYSICS конструкторів, однак створення складних геометричних об'єктів за допомогою вбудованих конструкторів займає багато часу. Такі об'єкти простіше створювати в спеціалізованих програмах для графічного моделювання (наприклад, Autocad) і імпортувати їх у середовище COMSOL MULTIPHYSICS.

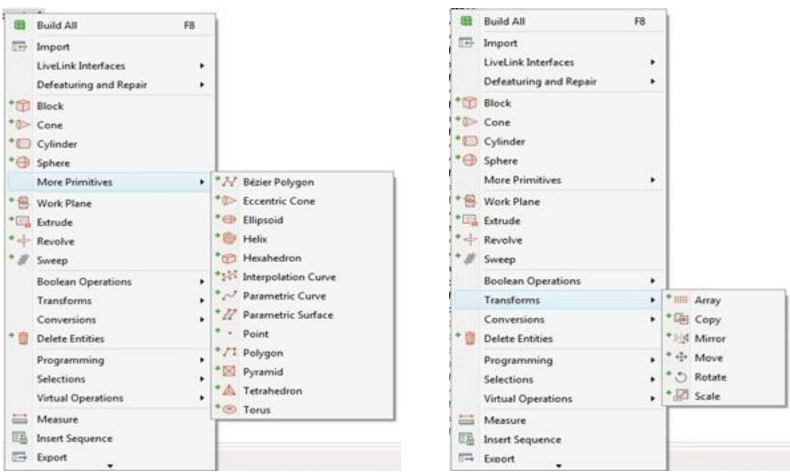
6.1 Побудова розрахункової області засобами COMSOL Multiphysics

Очевидно, що методика створення геометричної моделі залежить від розмірності простору, у якому перебуває ця модель. В COMSOL MULTIPHYSICS передбачені часові і одно-, двох-, трьохмірні просторово-часові дослідження. Розглянемо створення просторових моделей в одно-, двох-, трьохмірному випадках окремо. Щоб мати можливість створювати геометричну модель, необхідно в КОНСТРУКТОРІ МОДЕЛЕЙ (MODEL BUILDER) вибрати відповідний пункт, відповідальний за геометрію (тоді на панелі з'являться необхідні кнопки), або нажати правою кнопкою миші на цьому пункті меню й використовувати потрібні об'єкти й операції.

Створення геометрії одномірної моделі є тривіальною задачею, тому що в якості об'єктів виступають тільки точка (DRAW POINT ) і інтервал (DRAW INTERVAL ), які можна перетворювати одна в одну за допомогою операцій CONVERT TO SOLID  і CONVERT TO POINT . Використання операції CONVERT TO POINT означає відображення інтервалу в його граничні й внутрішні (якщо вони є) точки, а використання операції CONVERT TO SOLID означає з'єднання двох точок в інтервал (відрізок). Очевидно, що одну точку відобразити в інтервал не можна, тому застосування операції CONVERT TO SOLID до однієї точки просто видаляє її. Відзначимо, що після застосування CONVERT TO POINT отримані дві або більше точок розглядаються як один об’єкт, а щоб відокремити їхній друг від друга, необхідно застосувати операцію Split . Існує можливість в одній моделі створювати кілька об’єктів (наприклад, кілька інтервалів), і передбачені операції теорії множин над ними (Об’єднання (Union) ∪ = , Перетинання (Interselection) ∩ = , Доповнення (DiffeRence) / =).

Створення одномірної моделі є окремии випадком двомірного моделювання, тому режим двомірного моделювання містить у собі всі елементи одномірного за винятком того, що у двомірному випадку об’єкт Інтервал (Draw Interval) замінено на ламану лінію (Draw line). У режимі двомірного моделювання додаються кнопки створення кривих Безье Draw Quadratic , Draw Cubic і стандартних двомірних фігур .Тим самим, з’являється можливість відображати двомірні об’єкти (поверхні) в одномірні (Convert to Curve) і навпаки.

При конструюванні трьохмірних фізичних моделей найпростішим і ефективним способом є побудова складної фігури із стандартних шаблонів об’єктів з використанням операцій теорії множин. В COMSOL Multiphysics шаблоновими об’єктами є базові 1D, 2D, 3D конструкції (рис. 16а), над якими можна проводити різного роду перетворення (рис. 16б).



а б

Рис. 16 Меню: а – вибору об’єктів для трьохмірного моделювання; б – основних операцій над ними

Створення 3D моделей є окремою задачею, докладний опис якої можна знайти в Інтернет-Ресурсах [2], або у відповідній літературі. Після створення об’єкта для його відображення досить нажати на ньому правою кнопкою миші й вибрати пункт BUILD SELECTED (рис. 17). Відзначимо, що на рис. 16 і 17 присутні численні пункти меню, які не мають прямого відношення до шаблонів об’єктів і зміст яких очевидний.

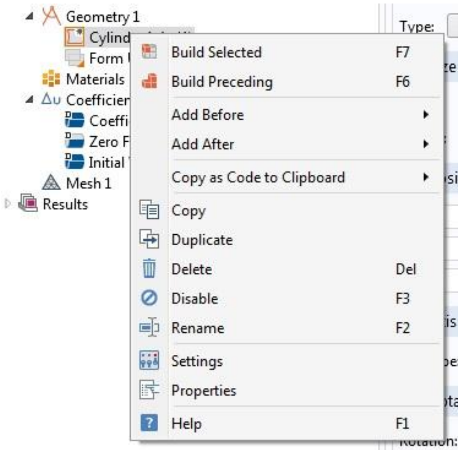


Рис. 17 Меню одного з базових геометричних об’єктів (для всіх об’єктів воно аналогічне)

Відзначимо, що в складних об’єктах для наочності іноді потрібно зробити невидимим який-небудь елемент системи. Наприклад, зробити невидимим повітря. Це можна здійснити за допомогою SUPPRESS (ПРИХОВАННЯ).

6.2 Побудова розрахункової області в спеціалізованих програмах і її імпорт в COMSOL Multiphysics

В COMSOL MULTIPHYSICS передбачений імпорт об’єктів геометрії зі спеціалізованих програмних продуктів 2D і 3D проектування. Ця процедура здійснюється за допомогою пункту IMPORT (рис.16). Для імпорту геометрії, створеної в спеціалізованому програмному забезпеченні, досить указати шлях до файлу в полі FILENAME у НАЛАШТУВАННЯХ (SETTINGS) вузла IMPORT й нажати кнопку IMPORT (рис. 18).

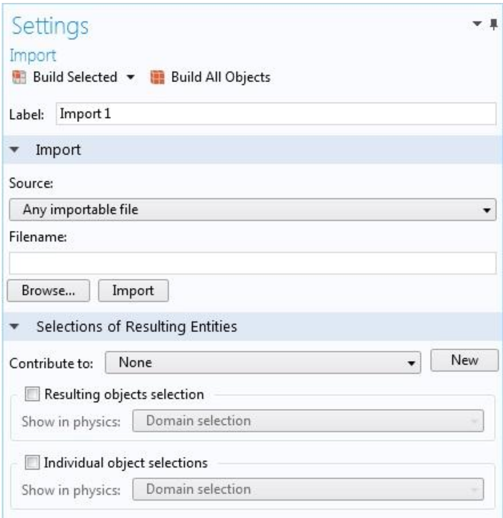


Рис. 18. Вікно імпорту геометрії (аналогічне вікно для імпорту у всіх об'єктів)

В COMSOL Multiphysics передбачений імпорт форматів з наступних программих продуктів: Autodesk Inventor, CATIA V5, IGES, Parasolid, Pro/ENGINEER, SAT, Solidworks, STEP.

Можливий імпорт об'єктів, створених за допомогою трьохмірного сканера.

Як приклад приведемо результат імпорту .sat-файлу, створеного в програмі трьохмірного моделювання (рис. 19).

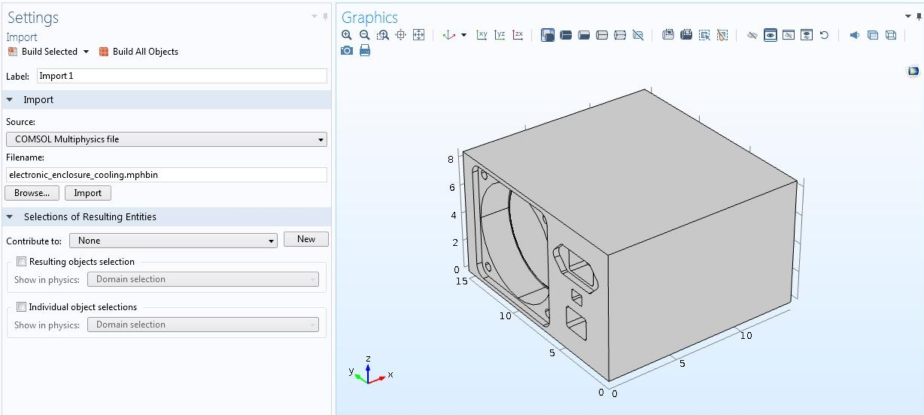


Рис. 19. Приклад імпортованої геометрії, змодельованої в спеціалізованому програмному забезпеченні

6.3 Завдання до розділу

1) Побудувати розрахункову область для моделі:

а) нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних у вигляді інтервалу, заданого двома точками;

б) стаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних у вигляді інтервалу, заданого трьома точками;

в) нестаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних у вигляді кола;

г) стаціонарного трьохмірного рівняння в частинних похідних у вигляді піраміди;

д) системи трьох рівнянь: нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних, стаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних і одномірного рівняння в частинних похідних для розв’язку задачі на власні значення у вигляді інтервалу, заданого двома точками;

е) нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних у полярній системі координат у вигляді інтервалу, заданого двома точками.

2) Побудувати розрахункову область для моделі:

а) системи трьох нестаціонарних одномірних рівнянь у частинних похідних у вигляді інтервалу від a до b для двох із цих рівнянь і інтервалу від c до d для третього рівняння, причому $a < c < b < d$. Взаємодія процесів, що протікають у цій моделі на інтервалі від a до b, із процесом, що протікають на інтервалі від c до d, відбувається тільки в одній точці c, тобто точка c належить (a, b), а точка b не належить (c, d);

б) системи двох нестаціонарних двомірних рівнянь у частинних похідних у вигляді кругової області для одного із цих рівнянь і квадратної області для іншого. Діаметр кола дорівнює стороні квадрата, і одна зі сторін квадрата належить колу, а всі інші точки квадрата не належать йому;

в) системи чотирьох рівнянь (нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних, нестаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних, стаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних і одномірного рівняння в частинних похідних для розв’язку задачі на власні значення) довільним чином;

г) системи двох стаціонарних трьохмірних рівнянь у частинних похідних у вигляді двох перетнутих однакових куль, причому центр однієї із куль лежить на поверхні іншої і у не перетнутій області першої кулі справедливо тільки одне з рівнянь, а в не перетнутій області другої сфери справедливо тільки друге рівняння;

д) системи трьох рівнянь (нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних, стаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних, нестаціонарного трьохмірного рівняння в частинних похідних) довільним чином.

3) Побудувати розрахункову область для:

а) двомірної моделі електростатичного поля в циліндричній системі координат у вигляді прямокутника зі стороною $2a$, усередині якого вирізано коло радіуса $R = a/2$;

б) у вигляді циліндра для трьохмірної моделі теплопередачі, включаючи провідність і конвекцію.

7 ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ЗАДАЧІ І ПОЧАТКОВИХ УМОВ

7.1 Визначення глобальних сталих, виразів, функцій і рівнянь

Як відзначалося в підрозділі 5.2, параметри e_a^{ij}, d_a^{ij}, f^i І Γ^{ik}, тощо можуть бути деякими функціями координат, часу, шуканих функцій, перших і других похідних від шуканих функцій і інтегралами від них. У розрахункових рівняннях можуть бути присутнім різні сталі, значення яких можуть різнитися для різних частин системи. У пакеті COMSOL MULTIPHYSICS існує потужний інструментарій для роботи із цими об'єктами. Більшість цих команд можна викликати за допомогою пункту GLOBAL DEFINITIONS в MODEL BUILDER (рис. 20).

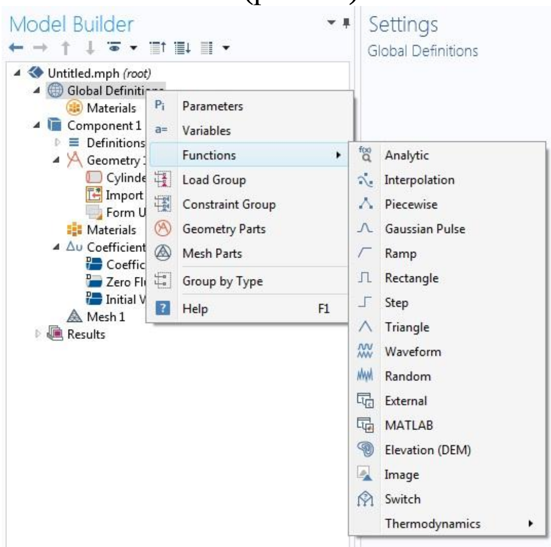


Рис. 20 Меню створення глобальних об'єктів

Рекомендується всі застосовані в моделі сталі винести у відповідний розділ цього пункту, а у всіх формулах задавати тільки позначення літерою. При потребі можна буде поміняти число в одному місці, а не робити виправлення по всьому меню. Список усіх часто вживаних сталих можна зберегти в окремий файл і переносити з моделі в модель. Відзначимо, що до кожної змінної можна написати примітку, при роботі кількох людей з однієї моделлю це є актуальною перевагою. Також можна зробити з виразами, скалярними виразами і т.д. Можна задати залежність фізичного параметра від часу t, координат x, y, z, або від будь-яких інших параметрів, які використовуються в моделі. Також існує можливість за допомогою зв'язаних змінних задавати дуже складні залежності між частинами системи (наприклад, зв'язати граничні умови з інтегралом за об'ємом).

Визначення часто використовуваних у моделі функцій може значно спростити процедуру моделювання. Також функцію можна визначити за допомогою масивів параметрів і масивів значень функцій, а по них побудувати інтерполяційну функцію, або задати метод інтерполяції й імпортувати дані із зовнішнього файлу. БІБЛІОТЕКА МАТЕРІАЛІВ (MATERIAL BROWSER) дозволяє задати будь-які фізичні властивості речовин, і навіть їх залежність від параметрів (наприклад, напруженості і тиску).

7.2 Визначення властивостей матеріалів (коефіцієнтів диференціальних рівнянь) і початкових умов

Після побудови геометрії і визначення усіх сталих необхідно задати властивості об'єктів моделі. Для цього достатньо у вікні MODEL BUILDER вибрати відповідний пункт і заповнити правильним чином відсутню інформацію у вікні SETTINGS. Для кожного з фізичних режимів вікно SETTINGS має свій вид. Наприклад, у випадку рівняння (15) ця процедура показана на рис. 21. У поле EQUATION зазначене поточне рівняння (15). У полі DOMAIN, необхідно вибрати область, для якої визначаються фізичні властивості (на рис. 21 ця область є кулею й позначена цифрою один). Якщо областей з однаковою властивістю багато, то потрібно виділити всі області з одного матеріалу. У полях CONSERVATIVE FLUX, SOURCE TERM, DAMPING OR MASS COEFFICIENT, MASS COEFFICIENT задаються значення параметрів e_a^{ij}, d_a^{ij}, f^i І Γ^{ik} рівняння (15).

У кожному з полів можна вводити математичні вирази, синтаксис той же, як в MATLAB, але зручніше вводити в поля не формули, а назви змінних і визначати їх через GLOBAL DEFINITIONS в MODEL BUILDER.

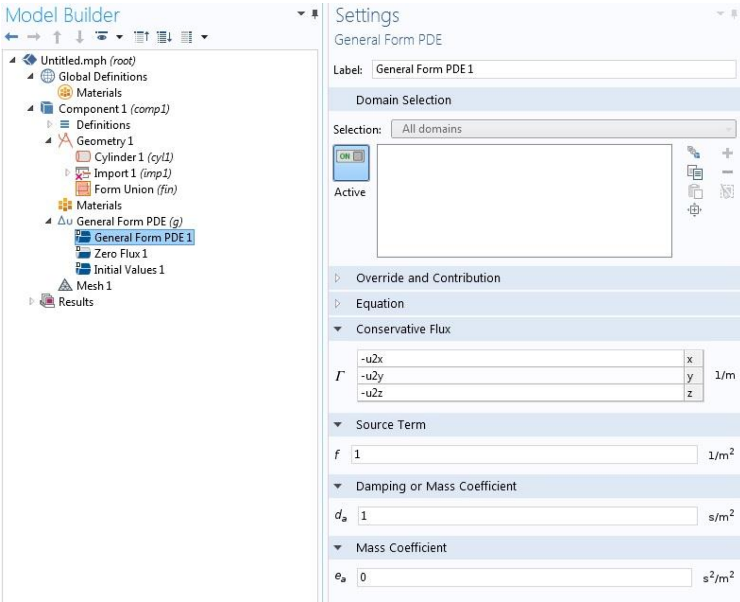


Рис. 21 Вікно, у якому визначаються налаштування моделі

Початкові умови задаються у вкладці INITIAL VALUES (рис.22).

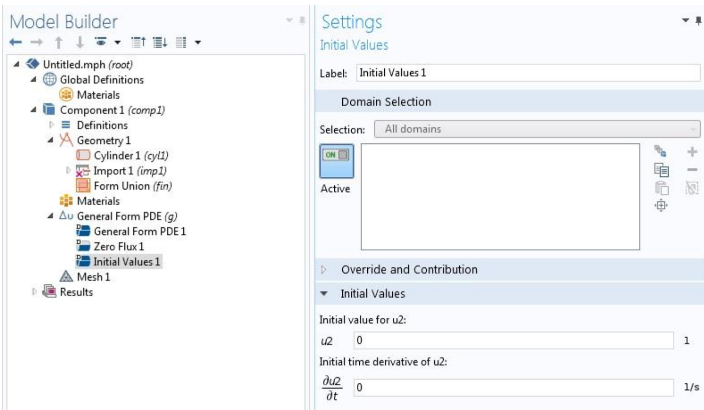


Рис. 22 Вікно для визначення початкових умов

Для нестаціонарного режиму в MODEL BUILDER можна задати крок за часом і т.д. Значення параметра TIMES відповідає визначенню часу в секундах. Орфографія описання TIMES така ж, як в MATLAB, тобто задається початкове й кінцеве значення, а між ними через двокрапку задається крок (наприклад, 0:0.1:10 –

зміна часу від нуля до десяти секунд з кроком в 0,1 с).

Відзначимо, що в COMSOL MULTIPHYSICS існує можливість при моделюванні застосовувати бібліотеку матеріалів MATERIAL BROWSER. Використання MATERIAL BROWSER дозволяє швидко й ефективно проводити моделювання фізичних систем з реальними параметрами.

7.3 Визначення граничних умов

Задачу про граничні умови в COMSOL MULTIPHYSICS можна розділити на три види: задача Діріхлє, задача Неймана й періодичні граничні умови.

Задача Діріхлє, перша крайова задача – задача відшукання в області D евклидового простору гармонійної функції u, яка на границі ∂D області D збігається з наперед заданою безперервною функцією $\varphi : \partial D \rightarrow \mathrm{R}$. Задачу відшукання регулярного в області розв'язку еліптичного рівняння 2-го порядку, який приймає наперед задані значення на границі області і називають задачею Діріхлє.

Задача Неймана, друга крайова задача – крайова задача у диференціальних рівняннях із заданими умовами на границі області для похідної шуканої функції – так звані граничні умови другого роду. По типу області задачі Неймана можна розділити на два типи: внутрішні й зовнішні.

Періодичні граничні умови використовують, коли при досягненні деякої границі $x = \alpha$ відбувається переміщення x на іншу границю $x = \beta$, звідки процес продовжує поширюватися.

Розглянемо процедуру завдання граничних умов в COMSOL MULTIPHYSICS на прикладі моделі з базовим рівнянням (15). Нехай є двомірна модель кола одиничного радіуса із центром на початку координат і для цієї моделі протікає процес, який можна описати рівнянням (15). Наприклад, окремим випадком рівняння (15) є рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial u}{\partial t} = (\nabla, a^2 \nabla u) + f \,. \tag{17}$$

Тут $u = u(\vec{r},t)$ – температура, a^2 – коефіцієнт теплопровідності, $f = f(\vec{r},t)$ – функція, яка описує джерела тепла.

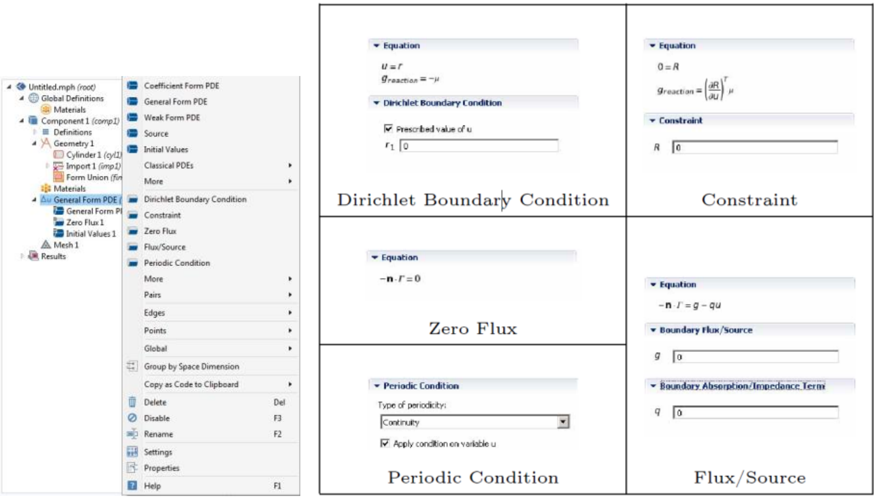


Рис. 23 Поля для визначення граничних умов

Щоб поставити задачу про граничні умови для рівняння (17) в COMSOL Multiphysics (рис. 23), досить в Model Builder викликати меню (нажати праву кнопку миші на PDE), у якому надається можливість вибрати тип граничних умов.

Dirichlet Boundary Condition і Constraint відносяться до задачі Діріхле й дозволяють задавати умови для значень функції *u* на границі розрахункової області. Zero Flux і Flux/Source – це граничні умови Неймана, при яких на границі розрахункової області задаються значення градієнтів. Periodic Condition означають періодичні граничні умови.

В системі MATLAB є велика бібліотека математичних функцій. Ці функції мають таку ж орфографію і в COMSOL Multiphysics. Аргументи функції завжди вказуються в круглих дужках після імені функції і, якщо їх більше одного, розділяються комами. Аргументами можуть бути інші функції і будь-які вирази мовою MATLAB (за умови відповідності типів аргументів). Відзначимо, що тип результату обчислення математичної функції завжди збігається з типом її аргументу. Наприклад, якщо аргументом функції MATLAB є вектор-стовпець, то значенням цієї функції також буде вектор-стовпець. У такий же спосіб ці функції можна використовувати в COMSOL Multiphysics.

7.4 Завдання до розділу

1) Задати наступні рівняння:

а) нестаціонарне одномірне рівняння в частинних похідних

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}\Psi(x,t)+E_p(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t),$$

де i – уявна одиниця, $\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$, h – постійна Планка; m – маса частки (електрона), $E_p(x)$ – зовнішня по відношенню до частки потенційна енергія в точці x

$$E_p(x)=\{\begin{matrix}1 & 0<x<1,\\ 0 & x<0,1<x.\end{matrix}$$

Для визначення функції $E_p(x)$ використовувати пункт GLOBAL DEFINITIONS (рис.20);

б) стаціонарне одномірне рівняння в частинних похідних

$$\left(\frac{\partial}{\partial x^2}+\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x)=\left(\frac{d}{d\,x^2}+\frac{d}{d\,x}\right)\Psi(x)=f(x),$$

де $f(x)=cos(x)$.

Для завдання функції $f(x)$ використовувати пункт GLOBAL DEFINITIONS (рис.20);

в) одномірне рівняння, яке відповідає задачі на власні значення

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}\psi(x)+E_p(x)\psi(x)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x),$$

де параметри взяті з першого завдання, а

$$E_p(x)=\{\begin{matrix}1 & 0<x<1,\\ \infty & x<0,\ 1<x.\end{matrix}$$

Для визначення функції $E_p(x)$ використовувати пункт DEFINITIONS усередині створеної моделі, який є аналогом пункту GLOBAL DEFINITIONS (рис. 20);

г) нестаціонарне двомірне рівняння в частинних похідних

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t)+E_p(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t);$$

$$f = f(\vec{r},t),$$

де параметри взяті з першого завдання, а $E_p(\vec{r})$ – відносно частки зовнішня потенційна енергія в точці $\vec{r}(x_1, x_2)$

$$E_p(\vec{r}) = \frac{1}{\mathrm{ch}^2(|\vec{r}|)},$$

Δ – оператор Лапласа (або лапласіан), еквівалентний квадрату оператора набла і в 2-мірній системі координат має вигляд:

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}.$$

Для завдання функції $E_p(\vec{r})$ використовувати пункт GLOBAL DEFINITIONS (рис.20);

д) стаціонарне трьохмірне рівняння в частинних похідних

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + E_p(\vec{r})\psi(\vec{r}) = f(\vec{r}),$$

де параметри взяті з першого завдання, $f(\vec{r}) = |\vec{r}|$, а $E_p(\vec{r})$ – відносно частки зовнішня потенційна енергія у точці $\vec{r}(x_1, x_2, x_3)$ α

$$E_p(\vec{r}) = \frac{a}{r^2},$$

де a – деяка постійна. Δ – оператор Лапласа (або лапласіан), еквівалентний квадрату оператора набла і в 3-мірній системі координат має вигляд

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}.$$

Для завдання функції $E_p(\vec{r})$ використовувати пункт DEFINITIONS усередині створеної моделі, який є аналогом пункту GLOBAL DEFINITIONS (рис.20);

е) нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних у полярній системі координат

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,t) + E_p(r)\Psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t),$$

де параметри взяті з першого завдання, а $E_p(r)$ – зовнішня стосовно частки потенційна енергія в точці r

$$E_p(\vec{r}) = \frac{1}{r},$$

Δ – оператор Лапласа (або лапласіан) у полярній системі координат у силу незалежності шуканої функції від кута можна записати у вигляді

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r .$$

Для визначення функції $E_p(r)$ використовувати пункт GLOBAL DEFINITIONS (рис.20).

2) Задати наступні системи рівнянь:

а) нестаціонарного лінійного одномірного рівняння в частинних похідних і нестаціонарного нелінійного одномірного рівняння в частинних похідних

$$\begin{cases} u_{,t} = au_{,xx}, \\ w_{,t} = aw_{,xx} + \exp(kw/u)u. \end{cases}$$

Тут індекси $,t$ і $,xx$ визначають першу й другу частинні похідні за часом і координатами відповідно, a і k – деякі сталі. Для функції u задати граничні умови, які відповідають нульовому потоку на границі розрахункового інтервалу, а функцію w прийняти рівною нулю в цих точках;

б) двох стаціонарних і одного нестаціонарного одномірних рівнянь у частинних похідних

$$\begin{cases} u_{,xx} = u(au - bw) + (au - bw)^2, \\ w_{,xx} = w(au - bw), \\ v_{,t} = c(w + u)v_{,xx}, \end{cases}$$

с загальним інтервалом від a до b для функцій u, w і інтервалом від c до d для функції v, причому $a < c < b < d$. Тут індекси $,t$ і $,xx$ означають першу й другу частинні похідні за часом і координаті відповідно, a, b і c – деякі сталі. Взаємодія процесів, що протікають у цій моделі на інтервалі від a до b, із процесом, що протікають на інтервалі від c до d, відбувається тільки в інтервалі від c до b. Для функції u і w задати періодичні граничні умови, тобто $u(a) = u(b)$ і $w(a) = w(b)$, а функцію v покласти рівною нулю в точках c і d. Початкову умову задати у вигляді

$$u(x,0) = \cos(x);$$

в) двох нестаціонарних двомірних рівнянь у частинних похідних

$$\begin{cases} -u_{,t} + u_{,xx} + u_{,yy} + u^3 - w = 0, \\ -w_{,t} + w_{,xx} + u_{,yy} + w^3 - u = 0, \end{cases}$$

заданих на колі радіуса R. У якості граничної умови використовувати потік рівний нулю, а початкові умови задати у вигляді

$$\begin{cases} u(x,y,0) = \exp(-(x^2+y^2)), \\ w(x,y,0) = \exp(-(x^2+y^2)). \end{cases}$$

Тут індекси $,t$, $,xx$ і $,yy$ означають першу й другу частинні похідні за часом і координатами відповідно;

г) нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних, нестаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних, стаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних і стаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних

$$\begin{cases} u_{1,t} = u_{1,xx} + u_1 - u_1^3 \int u_2 dy, \\ -u_{2,t} + u_{2,xx} + u_{2,yy} + u_2^3 - u_3 = 0, \\ u_{3,xx} + u_{3,yy} - u_2 = 0, \\ u_{4,t} + u_{4,xx} + u_{1,x} - u_1 = 0. \end{cases}$$

Тут $u_1 = u_1(x,t)$, $u_2 = u_2(x,t)$, $u_3 = u_3(x,t)$, $u_4 = u_4(x,t)$, а індекси $,t$, $,xx$ і $,yy$ означають першу й другу частинні похідні за часом і координатам відповідно. Граничні і початкові умови вибрати довільними;

д) двох стаціонарних трьохмірних рівнянь у частинних похідних

$$\begin{cases} u_{,xx} + u_{,yy} + u_{,zz} = w, \\ w_{,xx} + w_{,yy} + w_{,zz} = u. \end{cases}$$

Тут $u = u(x,y,z)$, $w = w(x,y,z)$, а індекси $,xx$, $,yy$ і $,zz$ означають другі частинні похідні по координатах. Розрахункову область вибрати у вигляді куба. Початкові умови задати у вигляді

$$\begin{cases} u(x,y,0) = \exp(-((x+a)^2+y^2+z^2)), \\ w(x,y,0) = \exp(-((x-a)^2+y^2+z^2)). \end{cases}$$

Тут a – деяка стала. У якості граничної умови використовувати потік через дві протилежні сторони, який дорівнює одиниці, а на інших сторонах куба покласти значення u і w рівними нулю;

3) Задати наступні фізичні моделі:

а) двомірну симетричну щодо осі z модель електростатичного поля в циліндричній системі координат; початковий потенціал задати постійним. Матеріал об'єкта (розрахункової області) – кварц. Розрахункову область вибрати у вигляді квадрату зі стороною $2a$, усередині якого вирізано коло радіуса $R = a/2$, і потік через границі дорівнює нулю;

б) трьохмірну модель теплопередачі в кубічному твердому тілі з однією стороною в якості джерела тепла з температурою T_1, протилежною стороною в якості холодильника з температурою T_2, а на інших сторонах покласти, що потік через границю дорівнює нулю.

8 ПОБУДОВА СІТКИ

Задавши геометрію, усі властивості й граничні умови моделі, необхідно провести розділення області на кінцеві елементи. Найбільш простим способом є вибір сітки за замовчуванням. Для цього досить в Model Builder вибрати відповідний пункт Mesh і скористатися кнопками в меню.

– В одномірному випадку .

– У двомірному випадку .

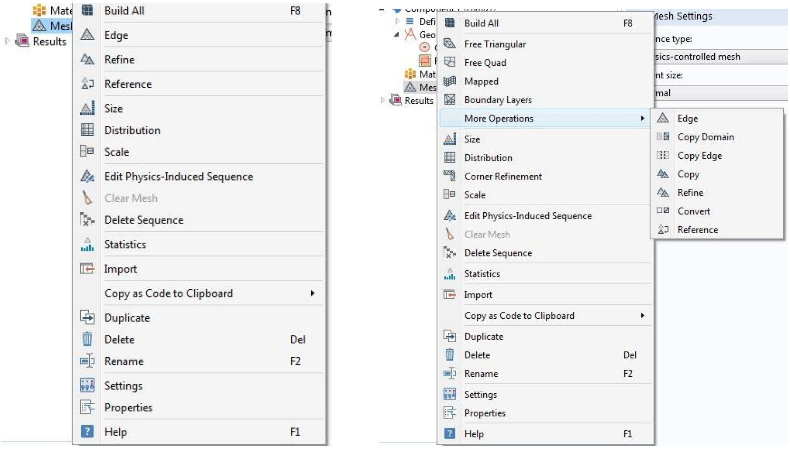
– У трьохмірному випадку .

При цьому існує можливість вибрати один зі стандартних в COMSOL Multiphysics розмірів кінцевих елементів (рис.24). У списку дев'ять режимів від ExtRemely fine (Надзвичайно точний) до Extremely Coarse (Надто грубий), інші розташовані між цими крайніми режимами.

Рис. 24 Меню різновидів розділення розрахункової області на кінцеві елементи із вказівкою точності

Для багатьох моделей, не пов'язаних з потоком, можна цим обмежитися, тому що система автоматично зробить згущення сітки для дрібних елементів, а якщо необхідно в якийсь частині системи згустити сітку, то можна вказати потрібну область за допомогою пункту Refine з меню Mesh (рис.25).

Результат згущення сітки в локальній області показаний на рис.26. Провести цю процедуру можна, задавши значення границь області в Refine Elements In Box, або у двомірному випадку з допомогою натискання кнопки Draw Box..., яка стає активною після активації опції Specify bounding box. Розмір подрібненої сітки залежить від значення параметра Number of Refinements і методу Refinement Method.



а б

Рис. 25 Види кінцевих елементів і операцій над ними:
а – для одномірного, б – для двомірного випадку

У лінійних задачах одномірного й двомірного стаціонарного режиму можна просто робити найбільш дрібну сітку, тому що швидкість обчислення в цьому випадку буде мінятися незначно в порівнянні з розділенням, яка враховує особливості, що зв’язують геометрію розрахункової області і характер процесу, який протікає.

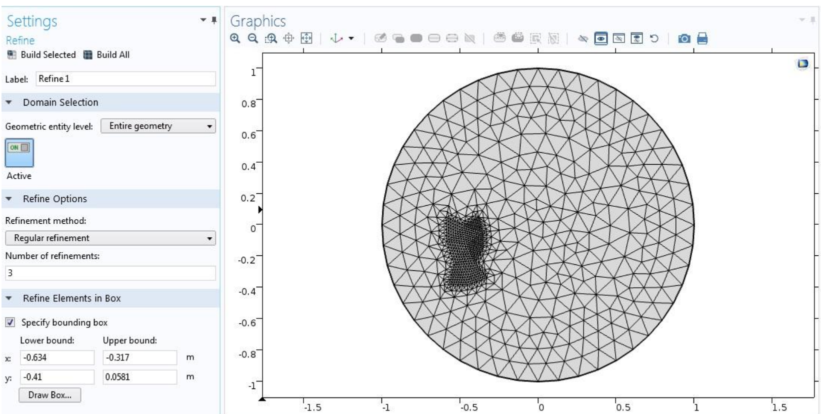


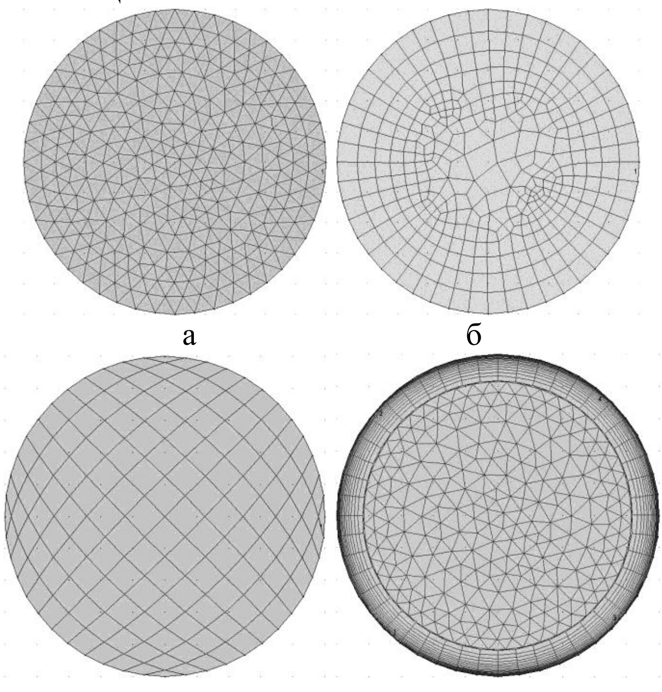
Рис. 26 Розділення двомірної області з використанням ущільнення в деякій кінцевій підобласті

Рекомендовано будувати сітку такої густоти, щоб між будь-якими двома границями було не менше десяти кінцевих елементів.

8.1 Типи і властивості сітки

Одномірний випадок є тривіальним, а у двомірному і трьохмірному режимі COMSOL MULTIPHYSICS за замовчуванням будує трикутну й тетраедричну сітку відповідно, але існує можливість завдання параметрів сітки, типу кінцевих елементів і способу розділення на кінцеві елементи.

На рис.25 показане меню, що дозволяє створювати сітку з різних типів кінцевих елементів.



а б

в г

Рис. 27. Основні види двомірного розділення в COMSOL MULTIPHYSICS: а – стандартне розділення на трикутні кінцеві елементи, б – стандартне розділення на чотирикутні кінцеві елементи, в – стандартне розділення на чотирикутні кінцеві елементи з урахуванням маски, г – стандартне розділення на трикутні кінцеві елементи з ущільненням уздовж границі

У двомірному випадку існує можливість використовувати наступні конструкції:

– FREE TRIANGULAR 2D – трикутна сітка (рис.27а);

– FREE QUAD – чотирикутна сітка (рис.27б);

– MAPPED – сітка, нанесена, як карта (рис.27в);

– BOUNDARY LAYERS – особливе розділення поблизу границі двомірної розрахункової області (рис.27г);

– EDGE – крайові одномірні умови.

Трикутна сітка є найбільш універсальною, тому що всі інші типи розділення можна легко перетворити в неї. Однак у двомірному режимі для об’єктів, близьких до прямокутних, можна задати чотирикутну сітку.

Трьохмірний варіант розділення реалізує наступні конструкції:

– FREE TRIANGULAR 3D – тетрагональна сітка (рис.28а);

– SWEPT – сітка, заснована на багатокутниках (рис.28б);

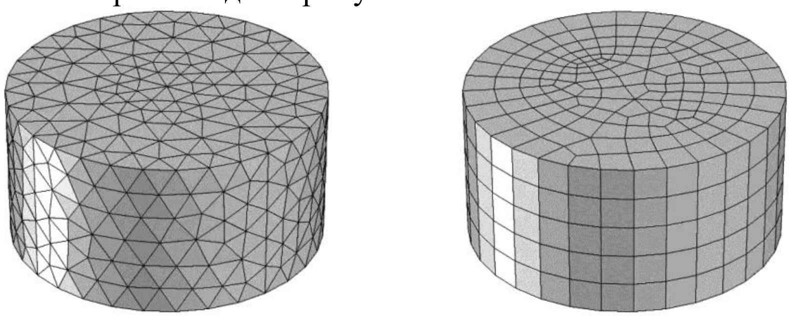
– BOUNDARY LAYERS – особливе розділення поблизу границі трьохмірної розрахункової області;

– FREE TRIANGULAR 2D – трикутна сітка поверхні трьохмірного об’єкта;

– FREE QUAD – чотирикутна сітка поверхні трьохмірного об’єкта;

– MAPPED – сітка, нанесена, як карта, на поверхню трьохмірного об’єкта;

– EDGE – крайові одномірні умови.



а б

Рис. 28. Основні види трьохмірної розділення в COMSOL MULTIPHYSICS: а – стандартне розділення на тетрагональні кінцеві елементи, б – стандартне розділення на кінцеві елементи у вигляді призм

Відзначимо, що метод кінцевих елементів має ряд специфічних особливостей, пов’язаних із близькістю або відмінностями чисельного розв’язку і реального процесу. У деяких випадках можлива ситуація коли помилка, яка накопичується може привести до збіжного чисельного розв’язку, який не має відносини до вихідної задачі, є наслідком геометрії кінцевих елементів і вийшло внаслідок специфічного розділення. У цих випадках для ймовірної достовірності отриманих результатів слід проводити чисельне моделювання із застосуванням декількох типів розділення.

У трьохмірному випадку завдання сітки на основі багатокутників є проблематичним для сферичних об’єктів і інших об’єктів із складною геометрією.

Щоб задати особливі розміри для кінцевих елементів, треба в MODEL BUILDER ⇒ MESH ⇒ SIZE поміняти відповідні опції в ELEMENT SIZE PARAMETERS (рис.29). У полях можна задати власні значення параметрів сітки. MAXIMUM ELEMENT SIZE й MINIMUM ELEMENT SIZE задає максимальний і мінімальний розміри елемента.

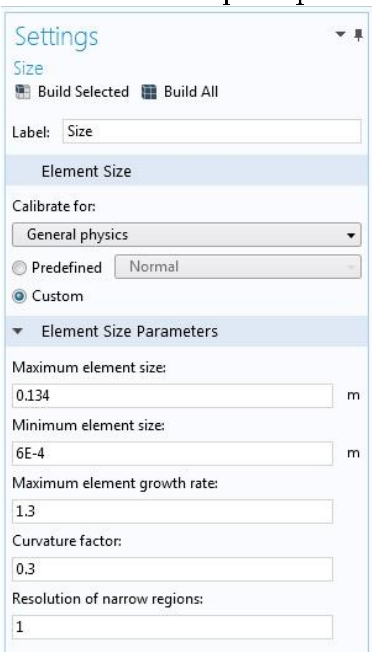


Рис. 29 Налаштування параметрів кінцевих елементів

MAXIMUM ELEMENT GROWTH RATE (ТЕМП РОСТУ ЕЛЕМЕНТА) визначає ступінь згущення від одиниці до нескінченності, чим ближче значення до одиниці, тим сітка рівномірніша.

RESOLUTION OF CURVATURE – чим менше це значення, тим точніше задана криволінійність границі. При більших значеннях цього параметра замість кривої буде використовуватися ламана лінія.

RESOLUTION OF NARROW REGIONS задає мінімальну кількість елементів по самій короткій границі. Для точних обчислень рекомендується встановлювати значення цього параметра не менше десяти.

Існує можливість окремо створювати розділення (задавати кінцеві елементи) для поверхонь, кривих і точок, що належать границі розрахункової області в трьохмірному випадку, а також для кривих і точок, що належать границі розрахункової області у двомірному випадку. Це робиться шляхом створення ще одного елемента SIZE в MODEL BUILDER.

Наприклад, розділення складної конструкції (модель фундаментних блоків і перекриття) на кінцеві елементи, імпортованої із стороннього формату (рис.19) має вигляд наведений на рис.30.

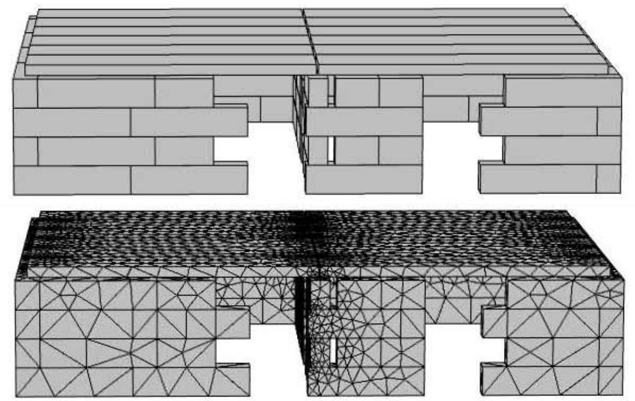


Рис. 30. Стандартне тетрагональне розділення для складної конструкції

8.2 Накладення декількох типів сіток на одну область

Для багатьох фізичних задач наперед є відомості про результат розв’язку. Залежно від кількості відомостей можна тим або іншим засобом зробити якісне оцінювання розв’язку і, ґрунтуючись на ньому, при потребі, накласти кілька типів сітки на одну розрахункову область. Такий підхід дозволяє або зменшити кількість кінцевих елементів, не зменшуючи точності розрахунків, або збільшити збіжність чисельного розв’язку.

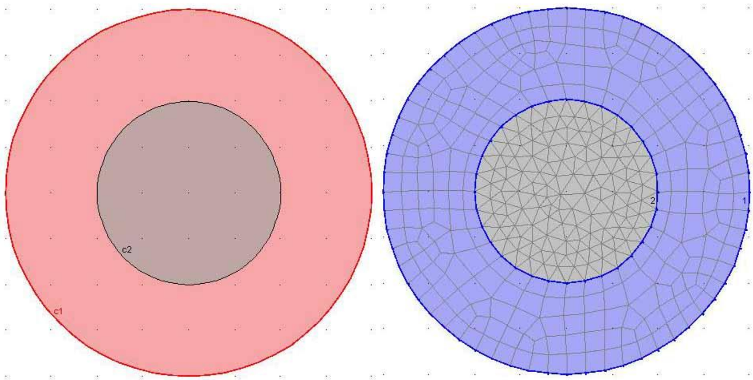
Одержати необхідні відомості для доцільності розділення розрахункової області декількома типами сіток і оцінити границі областей (у яких потрібно використовувати конкретний тип розділення) можна двома способами:

– з фізичних передумов або математичної оцінки моделі;

– з попереднього чисельного аналізу.

У першому випадку необхідно розуміти фізику явища або вміти математично правильно оцінити властивості моделюємого процесу, а отже, покладатися на досвід і знання автора моделі. Очевидно, що цей підхід сильно обмежений у своїх можливостях. Проводячи чисельне дослідження нового процесу, оптимізувати розділення з його допомогою складно. У другому випадку можна провести попередню оцінку моделюємого процесу на грубій сітці, здійснити розрахунки в деяких локальних підобластях розрахункової області. Мовою топології: скласти карту розрахункової області, яка складається з кінцевої кількості підмножин, і незалежно у кожній здійснити розрахунок моделюємого процесу. Вочевидь, що для якісної оцінки необхідно, або накласти кілька карт і зрівняти результати у відповідних областях перетинання, або накласти карту з попарно пересічних сусідніх підмножин, область перетинання яких має значні розміри. Такий підхід вимагає великих витрат ресурсів, не гарантує значного поліпшення якості і може привести до зворотного ефекту, тому його слід застосовувати тільки в задачах особливої складності.

Припустимо, що, скориставшись одним з підходів, були отримані данні, що у внутрішній частині з радіусом r кругової двомірної структури деякого радіусу R ефективніше використовувати розділення на трикутні кінцеві елементи, а в частині, що залишився, – прямокутні. Для цього поділу на кінцеві елементи необхідно зшити їх на сумісній границі, тобто на колі радіуса r. COMSOL MULTIPHYSICS реалізує процедуру зшивки автоматично, тому досить створити два кругові об’єкти (рис.31а), створити два типи розділення в пункті MESH, задати в цих типах розділення відповідність між ними й круговими об’єктами, виконати процедуру розділення на кінцеві елементи (рис.31б).



а б

Рис. 31. Розділення на кінцеві елементи двох типів на одному об’єкті

8.3 Завдання до розділу

1) Розбити розрахункові області, створені для однойменних завдань у розділі 6, на кінцеві елементи:

а) регулярним чином зі стандартними параметрами;

б) ліву частину інтервалу (від a до b) регулярним чином зі стандартними параметрами, а на правій частині інтервалу (від b до c) з використанням REFINE збільшити кількість (щільність) кінцевих елементів удвічі;

в) трикутного виду, причому щільність кінцевих елементів у міру наближення до центру області повинна збільшуватися як $1/(R+1)$ (вказівка: процедуру здійснити за допомогою дискретного застосування REFINE, тобто кругова область ділиться на кільцеві шари і до кожного з кілець застосовується REFINE зі збільшенням щільності), розміри кінцевих елементів вибрати стандартним чином;

г) регулярним чином і ущільнити розділення у два рази у верхній частині, починаючи із середини висоти. Параметри кінцевих елементів задати вручну довільним чином;

д) – для нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних провести розділення інтервалу регулярним чином, які складаються з трьохсот п'ятдесяти одного кінцевого елемента;

– для стаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних провести розділення інтервалу відповідно до формули $\sqrt{x}$, де $a<x<b$, $b-a$ – довжина інтервалу (вказівка: процедуру здійснити за допомогою DISTRIBUTION). Кількість кінцевих елементів не повинне перевищувати двох тисяч;

– для задачі на власні значення інтервал розбити регулярним чином зі стандартними параметрами кінцевих елементів;

е) щільність кінцевих елементів у міру наближення від границі області до центру повинна збільшуватися як $1/(R+1)$ (вказівка: процедуру здійснити за допомогою DISTRIBUTION). Кількість кінцевих елементів не повинне перевищувати двох тисяч;

2) Розбити на кінцеві елементи розрахункові області, створені для однойменних завдань у розділі 6:

а) регулярним чином інтервал від a до b і експонентним – інтервал від c до d, причому $a < c < b < d$;

б) – регулярним чином на елементи трикутного виду для кругової області, причому щільність кінцевих елементів у міру наближення від границі області до центру повинна збільшуватися як $1/(R+1)$ (вказівка: процедуру здійснити за допомогою DISTRIBUTION);

– прямокутного виду для квадратної області, причому щільність кінцевих елементів в області перетинання кола і квадрата збільшити у два рази (вказівка: процедуру здійснити за допомогою REFINE). Відзначимо, що діаметр кола дорівнює стороні квадрата, і одна зі сторін квадрата належить колу, а всі інші точки сторін квадрата не належать йому;

в) – для інтервалу нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних відповідно до залежності x^2, де $a < x < b$, $b-a$ – довжина інтервалу (вказівка: процедуру здійснити за допомогою DISTRIBUTION);

– для нестаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних на елементи трикутного виду;

– для стаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних застосувати комбінацію трикутних і чотирикутних елементів, причому поблизу границі збільшити щільність кінцевих елементів у три рази (вказівка: процедуру здійснити за допомогою REFINE);

– для задачі на власні значення інтервал розбити рівномірно, зі стандартними параметрами кінцевих елементів;

г) * на елементи тетрагонального виду. Розміри кінцевих елементів вибрати стандартним чином. В області перетинання куль збільшити щільність кінцевих елементів у два рази (вказівка: процедуру здійснити за допомогою REFINE). В області перетинання граничних областей одна з одною збільшити щільність кінцевих елементів;

д) – для нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних зробити розділення регулярним чином рівномірно по всьому інтервалу;

– для стаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних застосувати трикутні кінцеві елементи, причому щільність кінцевих елементів у міру наближення до центру повинна збільшуватися лінійним чином (вказівка: процедуру здійснити за допомогою декількох дискретних застосувань REFINE, тобто область ділиться на підобласті і до кожної з них застосовується REFINE зі збільшенням щільності), розміри кінцевих елементів вибрати стандартним чином;

– для нестаціонарного трьохмірного рівняння в частинних похідних застосувати стандартне розділення на кінцеві елементи тетрагонального виду;

3) Розбити розрахункові області, створені для однойменних завдань у розділі 6, на кінцеві елементи:

а) трикутного виду для двомірної моделі електростатичного поля в циліндричній системі координат у вигляді квадрату зі стороною $2a$, усередині якого вирізано коло радіуса $R=a/2$. Поблизу внутрішньої границі ущільнити розділення прямокутними кінцевими елементами в три рази;

б) у вигляді прямокутних призм із трикутною основою і ущільнити нижню частину циліндра у два рази, починаючи із середини висоти.

4) * Розбити розрахункові області, створені для однойменних завдань у розділі 6, на кінцеві елементи:

а) * для моделі трансформатора розбити пластини на прямокутні призми із трикутною основою, дроти на елементи тетрагонального виду, а ізолюючий матеріал – найбільш доцільним чином залежно від створеної моделі;

б) * тетрагонального виду для диска автомобільного колеса, а шини найбільш ефективним чином залежно від створеної моделі.

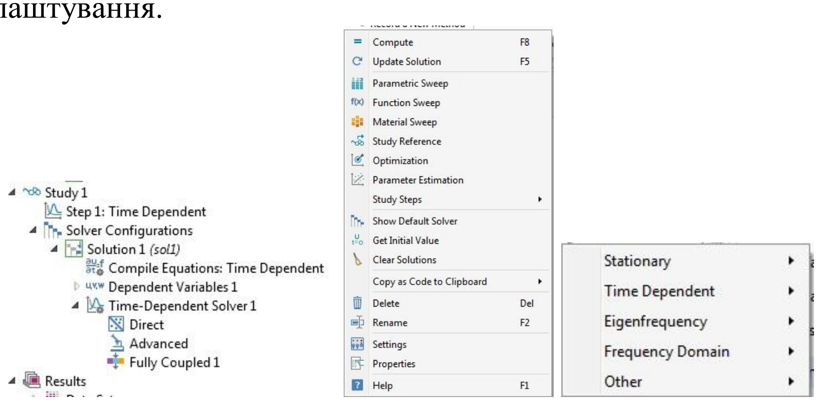
Символ * означає підвищену складність задачі.

9 ВИРІШУВАЧІ І ЇХ ХАРАКТЕРИСТИКИ

9.1 Типи розрахунків. Визначення і найпростіше використання вирішувачів

Вочевидь, що від параметрів обчислювального обладнання залежить достовірність обчислень і правильна оптимізація розв'язку. Неправильне налаштування може привести до грубих помилок розв'язку, які важко виявити. Некоректний добір параметрів може привести до тривалих розрахунків тривіальної задачі, тому правильний вибір вирішувача і його налаштувань є одним з базових етапів моделювання.

Для створення вирішувача в COMSOL Multiphysics досить в Model Builder створити пункт Study, а всередині нього створити вирішувач Solver Configuration ⇒ Solver (рис.32а) або здійснити розрахунок з налаштуваннями за замовчуванням, натиснувши Compute (рис.32б). Відзначимо, що існує сім типів розрахунків (рис.32в), у кожному з яких свої вирішувачі й специфічні налаштування.



а б в

Рис. 32 Інтерфейс вирішувачів: а – меню Study, б – вирішувачі, в – їх різновиди

Вибираючи рахівне обладнання, треба в першу чергу визначитися: стаціонарний або перехідний процес ми вивчаємо. Якщо процес нестаціонарний, то в переважній більшості випадків підходить вирішувач Time Dependent. Для дуже рідких задач, пов'язаних зі знаходженням власних значень диференціальних рівнянь, наприклад хвильового рівняння, треба вибирати вирішувач EIGENVALUE. Налаштування вирішувача змінюються у відповідному вікні SETTINGS. В COMPILE EQUATIONS: TIME DEPENDENT вказуються налаштування, які потрібно використовувати при розрахунках (рис.33).

Якщо задача стационарна, то бажано визначити, лінійна вона або нелінійна. У випадку нелінійної системи рекомендується встановлювати нелінійний вирішувач. Для лінійної моделі використання нелінійного вирішувача буде коректним, але на обчислення затратиться більше часу, а якщо для нелінійної задачі встановити лінійний вирішувач, то будуть накопичуватися значні помилки. Також можливе застосування вирішувача, який лінеарізує нелінійну задачу, що є зручним для багатьох задач математичної фізики. Для лінійних і нелінійних стаціонарних задач можна вибрати параметричний вирішувач, у якому треба вказати параметри, для яких задається кілька значень.

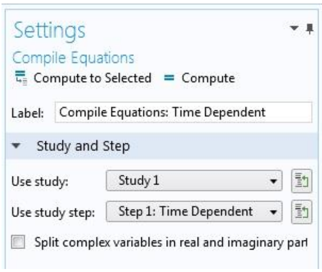


Рис. 33. Вікно COMPILE EQUATIONS: TIME DEPENDENT

Для TIME DEPENDENT в полі TIMES задаються часові прошарки і визначається крок за часом. Поля TOLERANCE визначають помилку на кожному кроці ітерації. Для того щоб одержати значення всіх кроків обчислювального пристрою, треба задати значення TIME STEPS FROM SOLVER для параметра, що цікавить нас (наприклад, в RESULTS WHILE SOLVING для UPDATE AT). Обчислювальний пристрій вибирає кроки довільно, залежно від динаміки системи, тобто ігнорує задані значення TIMES. Щоб обчислювальний пристрій враховував цей список (наприклад, якщо зовнішні впливи імпульсні і вирішувач може проскочити повз них), треба встановити TIME STEPS TAKEN BY SOLVER в значення STRICT або INTERMEDIATE замість діючого за замовчуванням FREE. У випадку інших вирішувачів необхідно зробити налаштування, відповідні до вимог задачі. Наприклад, для EIGENVALUE необхідно задати кількість власних значень рівняння в полі DESIRED NUMBER OF EIGENVALUES і значеня, близько яких шукати власні числа в полі SEARCH FOR EIGENVALUES AROUND. Для параметричних вирішувачів треба встановити ім'я параметра, який буде змінюватися в полі NAME OF PARAMETER, і значення, які він буде ухвалювати в поле LIST OF PARAMETER VALUES. Для нелінійних вирішувачів можна вказати кількість ітерацій. Також існує можливість задати тип матриці, яка використовується при розрахунках. Параметр MATRIX SYMMETRY може ухвалювати значення SYMMETRIC, NOSYMMETRIC, HERMITIAN. При виборі відповідного лінійного вирішувача це прискорить розрахунки.

Для складних (як правило, нелінійних) чисельних процесів існує можливість налаштування вирішувачів. Натиснувши праву кнопку миші на типі розрахунків, одержимо відображення відповідного йому меню, у якому присутні пункти з наступного набору:

– DIRECT – дозволяє налаштовувати параметри для DIRECT LINEAR SYSTEM SOLVERS. DIRECT можна використовувати разом з усіма типами розрахунків.

– ITERATIVE – дозволяє налаштовувати параметри для ITERATIVE LINEAR SYSTEM SOLVERS. ITERATIVE є альтернативою DIRECT LINEAR SYSTEM SOLVERS і може використовуватися з усіма типами розрахунків.

– FULLY COUPLED – використовує метод Ньютона і використовується в STATIONARY SOLVEr й TIME-DEPENDENT SOLVER.

– SEGREGATED – дозволяє розділити процес розв'язку на кроки. Кожний крок використовує метод Ньютона. SEGREGATED, використовується в STATIONARY SOLVER, TIME-DEPENDENT SOLVER і є альтернативою FULLY COUPLED. Щоб додати кроки до SEGREGATED, досить нажати правою кнопкою миші на SEGREGATED й вибрати відповідний пункт: SEGREGATED STEP, LUMPED STEP, LOWER LIMIT.

– PARAMETRIC – може утворювати петлі по даному набору параметрів. Для кожного набору параметрів управляє послідовністю, яку візначають особливості. Можна поєднувати послідовності одну з одною ієрархічно, додаючи послідовність, яка вказує на інший вузол особливості. Використовується тільки в STATIONARY SOLVER.

– SENSITIVITY – вирішує проблему аналізу чутливості.

Використовується тільки в Stationary Solver.

– Adaptive Mesh Refinement – контейнер для розв’язку, отриманого за допомогою адаптивної функції, яка дозволяє змінювати сітку під час розрахунків. Використовується разом з Eigenvalue Solver й Stationary Solver.

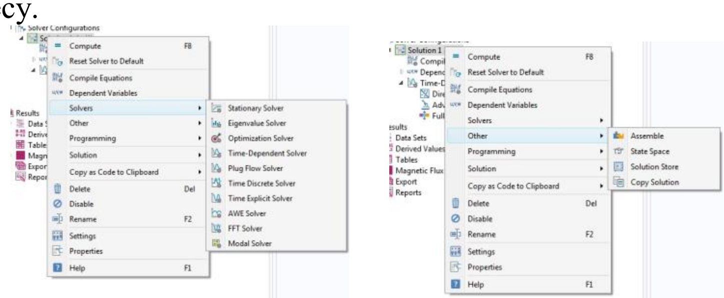
– Stop Condition – зупиняє вирішувач, коли зазначена умова виконана. Це – додаткова особливість ознаки Parametric attribute й Time-Dependent Solver.

Відзначимо, що DiRect й Iterative (Fully Coupled й Segregated) не можуть бути активними одночасно. Fully Coupled й Segregated можуть використовувати лінійний вирішувач Direct або Iterative.

Отже запустити розрахунки можна після здійснення всіх необхідних операцій: створення моделі, побудова розрахункової області, визначення параметрів задачі, визначення початкових і граничних умов, розділення розрахункової області на кінцеві елементи, вибір вирішувача. Для цього досить нажати праву кнопку миші на пункт Study в Model Builder і вибрати пункт меню Compute (рис.32б).

9.2 Налаштування типів розрахунків і методів

Розглянемо налаштування кожного з типів процесів (рис. 32в). При створенні вирішувача в ньому за замовчуванням створюються три пункти (для Time Dependent – рис. 32а): Compile Equations, Dependent Variables і налаштування моделюємого процесу.



а б

Рис. 34. Меню вирішувача з видами процесів

Однак існує можливість додавати інші налаштування (рис.34).

Пункти вирішувача, створювані за замовчуванням:

– Compile Equations – однакове для всіх типів процесів вікно налаштувань, у якому присутні два параметри Use Study і Use Study Step. Use Study дозволяє вибрати дослідження Study (цих досліджень можна створити декілька), а Use Study Step задає тип процесу при розрахунках (один із процесів, показаних на рис.32в);

– Dependent Variables – однаковий для всіх типів процесів підрозділ залежних змінних, який обробляє вихідні дані (початкові значення змінних) і масштабує змінні (наприклад, декілька змінних використовуються для системи рівнянь);

– Time-Dependent Solver – використовується для динамічних процесів типу Time Dependent. Має можливість визначення параметрів Times і різного роду розрахункових кроків за часом Tolerance. В Time Stepping можна вибрати один із трьох методів для моделювання процесу за часом і задати його налаштування. Параметр Method ухвалює наступні значення:

1) BDF – метод диференціювання назад [6, 7];

2) Generalized alpha – узагальнений α-метод [8, 9];

3) Initialization only – несуперечливі початкові значення, а потім зупинитися;

Для першого й другого методів за допомогою параметра Steps taken by Solver можна здійснити кілька способів розділення інтервалу часу при розрахунках. Параметр Steps Taken by Solver ухвалює наступні значення:

1) Free – вирішувач вибирає кроки за часом вільно;

2) Strict – вирішувач вибирає проміжну ланку так, щоб зробити, принаймні, один крок у кожному підпроміжку часу, візначеному в Times;

3) Intermediate – вирішувач вибирає проміжну ланку відповідно до розділення інтервалу часу в Times;

4) Manual (доступний тільки для Generalized alpha) – надає можливість вирішувачі перевизначити крок часу з ручним вибором. Відзначте, що ця опція також перевизначає локальну оцінку на кожному кроці;

– Stationary Solver – використовується за замовчуванням для процесів Stationary, Frequency Domain, отже, дозволяє вирішувати стаціонарні задачі і має можливість завдання параметрів Tolerance і Linearity. Параметр Linearity дозволяє задати властивості моделюємої системи, тобто задача є лінійною, нелінійною і чи може вона бути ліанізована.

– EIGENVALUE SOLVER – використовується за замовчуванням для процесів EIGENFREQUENCY, EIGENVALUE, отже, дозволяє вирішувати задачі на власні функції й власні значення. У полі DESIRED NUMBER OF EIGENVALUES задається кількість власних значень, а в EIGENVALUE TRANSFORMATION вказується, чи потрібно вирішувати задачу на власні функції (EIGENFREQUENCY);

– MODAL SOLVER – використовується за замовчуванням для процесів FREQUENCY DOMAIN MODAL, TIME-DEPENDENT MODAL. Вибір процесу здійснюється в полі STUDY TYPE, і залежно від цього процесу задаються властивості на вкладці GENERAL.

Налаштування інших підрозділів RESULTS WHILE SOLVING, OUTPUT, ADVANCED, LOG, які відносяться до TIME-DEPENDENT SOLVER, EIGENVALUE SOLVER, тощо, очевидні.

Додаткові пункти вирішувача:

– ASSEMBLE –використовується для одержання доступ до неопрацьованих даних будь-якої матриці або вектора від JAVA;

– STATE SPACE – використовується для експорту матриці STATE-SPACE з динамічного PDE до MATLAB;

– STORE SOLUTION – службова функція, яка дозволяє одержати доступ до проміжних результатів розв’язку;

– TIME DISCRETE SOLVER – альтернативний дискретний часовий вирішувач. Використовується для моделювання динамічних процесів, які були вже дискретизовані за часом;

– OPTIMIZATION SOLVER – задає налаштування, які дозволяють вирішувати проблеми оптимізації. Визначає ті частини налаштувань вирішувача, які незалежні від методу, який використовує SOLVER;

– AWE SOLVER – альтернативний вирішувач, який використовує асимптотичу оцінку.

9.3 Методи чисельного моделювання

У підрозділі 9.1 наведені пункти (вузли) вирішувача для відповідних процесів, які можуть використовувати різні методи чисельного моделювання. Очевидно, що залежно від методу чисельного моделювання може значно змінитися швидкість розрахунків, а для багатьох задач можна застосовувати тільки деякі із чисельних методів. Дамо коротку характеристику чисельних методів, які надає COMSOL MULTIPHYSICS.

Більша частина часу розрахунків зайнята розв'язком систем лінійних рівнянь, відповідає за їхній розв'язок LINEAR SOLVER, що відноситься до DIRECT, або ITERATIVE (може використовувати методи DIRECT), де можна використовувати наступні чисельні методи:

DIRECT

– MUMPS (MULTIFRONTAL MASSIVELY PARALLEL SPARSE DIRECT SOLVER)

– інтегроване середовище для паралельних розріджених матриць, яке призначене для розв'язку широкого кола задач, включаючи симетричні й несиметричні проблеми [10]. Пакет MUMPS використовує MULTIFRONTAL (мультифронтальний) підхід до факторизации матриці. Основна особливість методу MULTIFRONTAL полягає в тому, що загальне розкладання описується по збірці (структурі) дерева. Ефективність прямого вирішувача сильно залежить від порядку змінних;

– PARDISO – поточно-орієнтований пакет для розв'язку великих розріджених симетричних і несиметричних систем лінійних рівнянь. COMSOL MULTIPHYSICS використовує версію PARDISO, розвинену Олафом Шенком і ін. [11]. PARDISO працює із загальними системами $Ax=B$ і використовує методику хитавиці центру, яка перевіряє величину потенційного центру відносно деякого постійного порога ε, що дозволяє враховувати особливі точки й компенсувати їх;

– SPOOLES працює із загальними системами $Ax=B$, використовуючи MULTIFRONTAL метод і пряме розкладання на множники матриці A [12]. Коли матриця A симетрична або Ермітова, вирішувач використовує версію алгоритму, який заощаджує половину пам'яті.

Відзначимо, що для кожного із цих методів можна вибрати потрібний алгоритм, задавши значення параметра PREORDERING ALGORITHM.

ITERATIVE

– GMRES (GENERALIZED MINIMUM RESIDUAL) – ітераційний метод для загальних лінійних систем Ax = B, що дозволяє задавати число повторень перед перезапуском (параметр NUMBER OF ITERATIONS BEFORE RESTART), що дає можливість поліпшити збіжність у випадку збільшення числа ітерацій або збільшити швидкість розрахунків у випадку зменшення числа ітерацій [13], [14], [15];

– FGMRES (FLEXIBLE GENERALIZED MINIMUM RESIDUAL) – різновид методу GMRES, який може використовувати більш широкий клас попередніх об’єктів [16]. Можна використовувати будь-який ітераційний вирішувач у якості попереднього для FGMRES.

– BICGSTAB – використовує стабілізований ітераційний метод подвійно сполученного градієнта [13], [17] для того, щоб розв’язати загальні лінійні системи $Ax=B$. Час і вимоги до пам’яті в BICGSTAB не збільшуються із числом ітерацій. Тому, BICGSTAB, як правило, використовує менше пам’яті, чому GMRES.

– CONJUGATE GRADIENTS використовує ітераційний метод сполучених градієнтів [18], [19] для лінійних систем $Ax=B$, де матриця А позитивна, визначена, симетрична і Ермітова (ця умова достатня). Цей вирішувач використовує менше пам’яті, але застосується до обмеженого набору моделей.

Тут описані тільки деякі методи COMSOL MULTIPHYSICS. Відзначимо, що можливе використання методів UMFPACK, TAUCS тощо. Ітеративні вирішувачи використовують менше пам’яті, але треба стежити чи вони сходяться і якщо буде необхідно збільшувати кількість ітерацій.

9.4 Помилки розрахунків

COMSOL MULTIPHYSICS розглядає помилки при обчисленнях, використовуючи два різні способи залежно від того, можливо уникнути проблеми й продовжити операцію або операція повинна бути зупинена. У першому випадку в MODEL BUILDER з’являється пункт попередження (WARNING), а в другому – пункт помилка (ERROR).

В COMSOL MULTIPHYSICS можна виділити три найпоширеніші помилки при розрахунках:

1. Не визначені параметри. У побудованій моделі існують параметри, у яких не задані числові значення. У цьому випадку COMSOL MULTIPHYSICS зупиняє процес моделювання, тому що для реалізації розрахунків необхідно мати числові значення всіх параметрів задачі.

2. Критерії збіжності. Коли використовується ітераційний вирішувач, COMSOL MULTIPHYSICS оцінює помилку розв’язку, і, як тільки оцінка помилки стає достатньо малою, що визначене

критерієм конвергенції

$$\rho|M^{-1}(b - Ax)| < tol|M^{-1}b|, \qquad (18)$$

програма закінчує обчислення. Якщо процес не стаціонарний, то закінчується обчислення на одному кроці за часом і програма переходить до наступного кроку. Коли використовується прямій вирішувач, COMSOL MULTIPHYSICS може довільно здійснити перевірку на помилки, щоб визначити, чи виконується критерій конвергенції після кожного кроку.

У критерії (18), $b = Ax$ – це система лінійних рівнянь (A – матриця, b, x – вектори), величина M для кожного вирішувача різна, і її можна охарактеризувати в такий спосіб:

– для MUMPS, PARDISO і SPOOLES, $M = LU$, де L і U – це LU обчислений фактор вирішувача;

– у випадку використання з ітераційними вирішувачами GMRES, BICGSTAB й CONJUGATE GRADIENTS M є наперед визначеною матрицею;

– для інших ітераційних вирішувавів M є матрицею ідентичності.

Критерій конвергенції (18) закінчує ітераційну процедуру, коли прогнозована помилка стає менше параметра стійкості *tol*. Параметри стійкості, як відзначалося вище, можна задавати специфічним чином для різних вирішувачів. Відзначимо, що для вирішувачів, де M не є матрицею ідентичності, ітераційна процедура може іноді закінчуватися занадто рано. Якщо повторення закінчуються занадто рано, то необхідно зробити відповідне коригування.

У тому випадку, коли умова (18) порушується, ітераційний процес веде до розходження чисельної схеми. У більшості випадків цю проблему можна розв’язати уточненням сітки, тобто збільшенням кількості кінцевих елементів в областях з великими градієнтами. Однак існують задачі, у яких уточнення сітки не приводить до збіжності розв’язку. Такі задачі необхідно вирішувати за допомогою альтернативного підходу (наприклад, перейти в інше описання або зробити заміну змінних).

3. Недостатньо пам’яті: У випадку розділення області на дуже велику кількість кінцевих елементів при спробі здійснити розрахунок виникає помилка OUT OF MEMORY DURING ASSEMBLY, яка означає перевищення розмірів пам’яті комп’ютера. Ця проблема пов’язана із принциповими обмеженнями методів чисельного

моделювання. Очевидно, що число кінцевих елементів не може бути нескінченно великим, але часто потрібно підвищити точність розв'язуваної задачі. Розв'язок даної проблеми можна здійснити за допомогою:

– збільшення пам'яті обчислювального обладнання (комп'ютера), а, отже, можна буде збільшити кількість кінцевих елементів;

– перерозподілу кінцевих елементів, тобто згущення сітки в області великих градієнтів за рахунок областей з малими градієнтами. Відзначимо, що при такому підході необхідно мати уяву про розподіл градієнтів у розрахунковій області, а в ідеальному випадку задати залежність зміни густоти сітки від розподілу градієнтів;

– зміни, або спрощення вихідної моделі. Залежно від вихідної моделі COMSOL Multiphysics при однакових інших умовах може проводити чисельне моделювання з різною максимальною кількістю кінцевих елементів;

– вибору й налаштування оптимального вирішувача;

– розрахунків моделі в кожній з локальних підобластей окремо і зшивання розв'язків, якщо це можливо.

9.5 Завдання до розділу

1) Створити вирішувач і зробити обчислення для наступних рівнянь:

а) нестаціонарного одномірного рівняння в частинних похідних

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}\Psi(x,t)+E_p(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t),$$

де i – уявна одиниця, $\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$, h – постійна Планка; m – маса частки (електрона), $E_p(x)$– зовнішня відносно частки потенційна енергія в точці x

$$E_p(x) = \begin{cases} \cos(x) & -\frac{\pi}{2} < x < \frac{\pi}{2}, \\ 0 & x < -\frac{\pi}{2}, \quad \frac{\pi}{2} < x. \end{cases}$$

Для визначення функції $E_p(x)$ використовувати пункт Global Definitions. Розрахункову область задати регулярним чином зі стандартними параметрами. У часовому вирішувачі використовувати BDF метод. Здійснити розрахунки для різних параметрів методу BDF і оцінити вплив цих параметрів на процедуру обчислень (точність, час розрахунків, збіжність). Для просторового вирішувача використовувати метод за замовчуванням з його налаштуваннями. Початкові умови довільні;

б) одномірного рівняння, відповідного до задачі на власні значення:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}\psi(x) + E_p(x)\psi(x) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x),$$

де параметри взяті з першого завдання, а

$$E_p(x) = \frac{1}{\mathrm{ch}^2(x)}.$$

Для завдання функції $E_p(x)$ використовувати пункт Definitions усередині створеної моделі, який є аналогом пункту Global Definitions. У вирішувачі використовувати метод MUMPS. Провести розрахунки з усіма алгоритмами цього методу і зрівняти результати. Пояснити відмінності отриманих даних;

в) нестаціонарного двомірного рівняння в частинних похідних

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + E_p(\vec{r})\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t),$$

де параметри взяті з першого завдання, а $E_p(\vec{r})$ – зовнішня відносно частки потенційна енергія в точці $\vec{r}(x_1, x_2)$

$$E_p(\vec{r}) = \frac{1}{\mathrm{ch}^2(|\vec{r}|)}$$

Δ – оператор Лапласа (або лапласіан), еквівалентний квадрату оператора набла і в 2-вимірній системі координат має вигляд

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}$$

Для завдання функції $E_p(\vec{r})$ використовувати пункт GLOBAL DEFINITIONS. У часовому вирішувачі використовувати BDF метод з параметрами за замовчуванням. У просторовому вирішувачі використовувати методи PARDISO і SPOOLES. Провести розрахунки з усіма алгоритмами цих методів. Порівняти отримані результати;

г) стаціонарне однорідне трьохмірне рівняння в частинних похідних

$$-\frac{1}{2}\Delta\psi(\vec{r}) + \frac{1}{r^2}\psi(\vec{r}) = 0,$$

де $\vec{r}$ – радіус-вектор, Δ – оператор Лапласа (або лапласіан), який еквівалентний квадрату оператора набла і в 3-вимірній системі координат має вигляд

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$$

Для часового вирішувача підібрати найбільш ефективний варіант методу моделювання, його параметри і обґрунтувати вибір. У просторовому вирішувачі використовувати методи MUMPS з параметрами й алгоритмом за замовчуванням. Провести аналіз ітераційного й неітераційного вирішувачів;

д) нестаціонарне одномірне рівняння в частинних похідних у полярній системі координат

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,t) + \frac{1}{r}\Psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t),$$

де параметри взяті з першого завдання, Δ – оператор Лапласа (або лапласіан) у полярній системі координат у силу незалежності шуканої функції від кута можна записати у вигляді

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$$

У часовому вирішувачі застосувати метод GENERALIZED ALPHA. Здійснити розрахунки для різних параметрів методу GENERALIZED ALPHA і оцінити вплив цих параметрів на процедуру обчислень (точність, час розрахунків, збіжність). Для просторового вирішувача використовувати метод за замовчуванням з його налаштуваннями.

2) Створити вирішувач або декілька вирішувачів і зробити обчислення з використанням будь-яких методів розрахунків для наступних систем рівнянь (тут: кожний символ, який стоїть в індексах після коми, означає частинну похідну по відповідній змінній, функції u і w є шуканими і залежать від відповідних змінних, інші символи є або постійними, або довільними функціями свого аргументу у випадку, коли це зазначено. Усі невідомі величини, геометрію, граничні й початкові умови задати довільно:

а) двох лінійні диференціальні рівнянь у частинних похідних другого порядку

$$– \begin{cases} u_{,t} = au_{,xx} + b_1u + c_1w, \\ w_{,t} = aw_{,xx} + b_2u + c_2w. \end{cases}$$

$$– \begin{cases} u_{,t} = au_{,xx} + f_1(t)u + g_1(t)w, \\ w_{,t} = aw_{,xx} + f_2(t)u + g_2(t)w. \end{cases}$$

$$– \begin{cases} u_{,tt} = ku_{,xx} + a_1u + b_1w, \\ w_{,tt} = kw_{,xx} + a_2u + b_2w. \end{cases}$$

б) двох нелінійні диференціальні рівнянь у частинних похідних параболічного типу

$$– \begin{cases} u_{,t} = au_{,xx} + u\exp(kw/u)f(u), \\ w_{,t} = aw_{,xx} + \exp(kw/u)[wf(u) + g(u)]. \end{cases}$$

$$– \begin{cases} u_{,t} = au_{,xx} + uf(bu - cw) + g(bu - cw), \\ w_{,t} = aw_{,xx} + wf(bu - cw) + h(bu - cw). \end{cases}$$

$$– \begin{cases} u_{,t} = au_{,xx} + e^{\lambda u}f(\lambda u - \sigma w), \\ w_{,t} = bw_{,xx} + e^{\lambda w}g(\lambda u - \sigma w). \end{cases}$$

в) двох нелінійні диференціальні рівнянь у частинних похідних еліптичного типу

$$– \begin{cases} u_{,xx} + u_{,yy} = uf(au - bw) + g(au - bw), \\ w_{,xx} + w_{,yy} = wf(au - bw) + h(au - bw). \end{cases}$$

$$– \begin{cases} u_{,xx} + u_{,yy} = e^{\lambda u}f(\lambda u - \sigma w), \\ w_{,xx} + w_{,yy} = e^{\lambda w}g(\lambda u - \sigma w). \end{cases}$$

$$– \begin{cases} u_{,xx} + u_{,yy} = uf(u/w), \\ w_{,xx} + w_{,yy} = wg(u/w). \end{cases}$$

г) двох нелінійні диференціальні рівнянь у частинних похідних гіперболічного типу

$$- \begin{cases} u_{,tt} = ax^{-n}(x^n u_{,x})_{,x} + uf(bu - cw) + g(bu - cw), \\ w_{,tt} = ax^{-n}(x^n w_{,x})_{,x} + wf(bu - cw) + h(bu - cw). \end{cases}$$

$$- \begin{cases} u_{,tt} = ax^{-n}(x^n u_{,x})_{,x} + e^{\lambda u} f(\lambda u - \sigma w), \\ w_{,tt} = bx^{-n}(x^n w_{,x})_{,x} + e^{\lambda w} g(\lambda u - \sigma w). \end{cases}$$

$$- \begin{cases} u_{,tt} = ax^{-n}(x^n u_{,x})_{,x} + uf(u/w), \\ w_{,tt} = bx^{-n}(x^n w_{,x})_{,x} + wg(u/w). \end{cases}$$

3) * Створити вирішувач або декілька вирішувачів і зробити обчислення з використанням будь-яких методів розрахунків для наступних фізичних систем:

а) * двомірної моделі електростатичного поля системи n заряджених часток (точкових зарядів), що займають у вакуумі прямокутну область із вирізаним у ній колом.

У цій області частки розташовані довільним чином. Заряд кожної із часток дорівнює випадковій величині, із значенням від нуля до одиниці. Знайти залежність конфігурації електростатичного поля усередині кола від кількості зарядів n.

б) * трьохмірної моделі теплопередачі в кубічному твердому тілі з однією стороною в якості джерела тепла, температура якого залежить від розподілу напруженості усередині області як $T_1 = \int\limits_V \mathrm{T}(V)dV$, протилежною стороною в якості холодильника з температурою T_2, а на інших сторонах потік через границю дорівнює нулю.

в) * моделі акустичного тиску звуку в трьохмірній кімнаті, створеніц в спеціалізованому програмному забезпеченні, призначеному для трьохмірного моделювання. Конфігурація кімнати й джерела звуку вибираються довільним чином;

г) * моделі процесу корозії для автомобільного колеса або якої-небудь аналогічної задачі.

Символ * означає підвищену складність задачі.

10 ОБРОБКА ОТРИМАНИХ ДАНИХ

Обробка результатів чисельного моделювання проводиться за допомогою об'єктів і опцій пункту RESULTS в MODEL BUILDER. Після завершення розв'язку, запущеного за допомогою пункту COMPUTE (рис.32б), у пункті RESULTS автоматично створюються об'єкти необхідні для графічного представлення результатів, а у вікні GRAPHIS відображається графічне представлення результату чисельного моделювання з параметрами відображення за замовчуванням. Наприклад, у двомірному випадку маємо результат, показаний на рис.35.

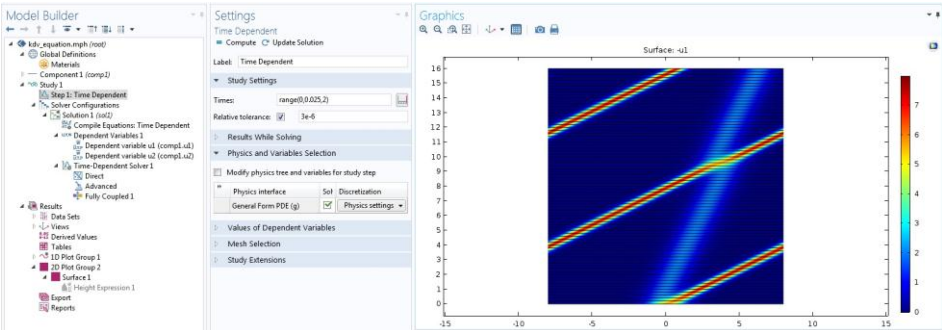


Рис. 35 Приклад двомірного графічного представлення розв'язку інтегро-диференціального нелокального рівняння дифузії

10.1 Вбудовані можливості COMSOL Multiphysics для аналізу результатів чисельного моделювання

Очевидно, що графічне представлення з параметрами за замовчуванням є актуальним тільки в деяких окремих випадках. Як правило, потрібно більш ретельний, у тому числі кількісний, аналіз даних і графічне представлення різноманітних залежностей фізичних величин від часу і координат. Іноді потрібні залежності складних виразів фізичних величин одного в одне (наприклад, залежність якого-небудь інтеграла руху від параметра задачі). Розглянемо можливості, надані COMSOL MULTIPHYSICS для реалізації якісного аналізу й наочного представлення отриманих результатів чисельного моделювання.

У пункті RESULTS існує чотири обов'язкові пункти, які утворюються автоматично при створенні моделі:

– DATA SETS – містять або звертаються до джерела даних для того, щоб створювати різні об'єкти PLOTS і REPORTS, нові набори даних різного типу. Наприклад, новий набір даних, отриманий з розв'язку якої-небудь задачі, може служити в якості сітки MESH. Усі графічні представлення результатів звертаються до наборів даних. Відзначимо, що отримані розв'язки завжди доступні як набір даних за замовчуванням.

– DERIVED VALUES – управляє отриманими в результаті роботи з DATA SETS наборами даних. Може інтегрувати будь-які дані після обробки, тобто дає можливість обчислювати такі величини, як потік, індуктивність, сили реакції, середні значення і т.д. Передбачені наступні типи інтегрування: інтеграл за об'ємом, поверхневий інтеграл і криволінійний інтеграл. В DERIVED VALUES можна провести оцінку виразів або змінних, визначених у деякій точці, або оцінити чисельне значення глобальної величини;

– TABLES – тут зберігаються дані, отримані за допомогою пункту EVALUTE ALL з меню DERIVED VALUES, або в створену таблицю можна додати дані. Заповнена значеннями таблиця відображається у вікні результатів RESULTS, яке за замовчуванням розташоване нижче графічного вікна GRAPHICS (рис.35);

– REPORT – забезпечують можливість експортувати дані у файли, а також створювати графічні представлення результатів і їх анімацію.

Щоб застосувати описані вище можливості пункту RESULTS для графічного представлення результатів, необхідно створити об'єкти, викликавши правою кнопкою миші на RESULTS відповідне меню (рис.36). У цьому меню передбачене створення одно-, дво-х і трьохмірних графічних об'єктів, причому незалежно від того, яка розмірність досліджуваного простору. Очевидно, що навіть в одномірному випадку може знадобитися представлення результатів у вигляді залежностей, які будуть двох або трьохмірними.

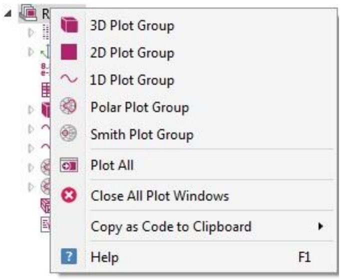


Рис. 36 Меню об'єктів графічної представлення результатів

Можливості пункту RESULTS ми розглянемо пізніше на прикладах конкретних задач загальної фізики й математичної фізики, тому що це найбільш ефективним спосіб їх показати.

10.2 Завдання до розділу

1) Скориставшись результатами чисельного моделювання з розділу 9, представити ці результати для однойменних завдань у вигляді:

а) двомірного графічного зображення початкової умови ($|\Psi(x,t)|^2$), двомірного графічного зображення, яке характерне для еволюційних етапів (якщо вони є), анімації отриманого результату ($|\Psi(x,t)|^2$) і трьохмірного графічного зображення поверхні, тобто залежності ($|\Psi(x,t)|^2$). Побудувати графік залежності середнього значення величини x від часу. Провести аналіз отриманих результатів;

б) двомірного графічного зображення власних функцій. Створити таблиці отриманих результатів для кожної із власних функцій і вивантажити їх в окремі файли. Провести аналіз отриманих результатів;

в) трьохмірного графічного зображення поверхні початкової умови ($|\Psi|^2$), трьохмірного графічного зображення поверхні, яке характерне для еволюційних етапів (якщо вони є), і трьохмірної анімації поверхні отриманого результату ($|\Psi|^2$). Побудувати графік залежності середнього значення величини $\vec{r}$ від часу. Провести аналіз отриманих результатів;

г) трьохмірного графічного зображення поверхні характерних перетинів початкової умови ($|\Psi|^2$), трьохмірного графічного зображення поверхні характерних перетинів еволюційних етапів (якщо вони є) і трьохмірної анімації цих поверхонь. Побудувати графік залежності середнього значення величини $\vec{r}$ від часу. Провести аналіз отриманих результатів;

д) двомірного графічного зображення початкової умови ($|\Psi(r,t)|^2$), двомірного графічного зображення, характерних для еволюційних етапів (якщо вони є), анімації отриманого результату ($|\Psi(r,t)|^2$) і трьохмірного графічного зображення поверхні, тобто залежності $|\Psi(r,t)|^2$. Побудувати анімацію трьохмірного зображення поверхні, яка моделюється рівнянням у полярних координатах (геометрично виконується за допомогою обертання на основі формули $x^2+y^2=r^2$). Побудувати графік залежності середнього значення величини r від часу. Провести аналіз отриманих результатів.

2) Скориставшись результатами чисельного моделювання з розділу 9, представити ці результати для однойменних завдань у вигляді:

а) двомірного графічного зображення початкової умови $u(x,\ 0)$, $w(x,\ 0)$, анімації отриманого результату $u(x,\ t)$, $w(x,\ t)$ і трьохмірного графічного зображення поверхонь $u(x,\ t)$, $w(x,\ t)$. Побудувати графік залежності середнього значення величини x для $u(x,\ t)$ і $w(x,\ t)$ від часу. Побудувати анімацію залежності u від w. Провести аналіз отриманих результатів;

б) двомірного графічного зображення початкової умови $u(x,\ 0)$, $w(x,\ 0)$, анімації отриманого результату $u(x,\ t)$, $w(x,\ t)$ і трьохмірного графічного зображення поверхонь $u(x,\ t)$, $w(x,\ t)$. Побудувати графік залежності середнього значення величини x для $u(x,\ t)$ і $w(x,\ t)$ від часу. Побудувати анімацію залежності u від w. Провести аналіз отриманих результатів з урахуванням властивостей рівнянь параболічного типу;

в) трьохмірного графічного зображення поверхонь $u(x,\ t)$, $w(x,\ t)$. Побудувати графік залежності u від w. Найти середні значення x і y для u і w. Побудувати графіки залежності $\int u(x,y)dx$, $\int u(x,y)dy$, $\int w(x,y)dx$, $\int w(x,y)dy$. Провести аналіз отриманих результатів з урахуванням властивостей рівнянь еліптичного типу;

г) двомірного графічного зображення початкової умови $u(x,\ 0)$, $w(x,\ 0)$, анімації отриманого результату $u(x,\ t)$, $w(x,\ t)$ і трьохмірного графічного зображення поверхонь $u(x, t)$, $w(x, t)$. Побудувати графік залежності середнього значення величини x для $u(x, t)$ і $w(x, t)$ від часу. Побудувати анімацію залежності u від w. Провести аналіз отриманих результатів з урахуванням властивостей рівнянь гіперболічного типу.

3) * Скориставшись результатами чисельного моделювання з розділу 9, представити ці результати для однойменних завдань у вигляді:

а) * зображення силових і еквіпотенціальних ліній для дискової області усередині квадрата. Побудувати анімацію зміни картини силових ліній залежно від збільшення кількості заряджених часток n, що займають у вакуумі прямокутну область із вирізаним у ній колом. Провести цю процедуру за результатами декількох розрахунків.

б) * графічного зображення розподілу тепла (значенню напруженості в кожній точці зіставити відповідний колір: максимум – червоного кольору, а мінімум – синього);

в) * графічного зображення поверхонь постійного акустичного тиску звуку в трьохмірній кімнаті;

г) * анімацію поширення процесу корозії в декількох перетинах автомобільного колеса або якої-небудь аналогічної задачі.

Символ * означає підвищену складність задачі.

11 БІБЛІОТЕКА МОДЕЛЕЙ COMSOL MULTIPHYSICS

Одним з найбільш ефективних і швидких підходів до вивчення графічних інтерфейсів користувача є вивчення середовища в процесі роботи, тобто на прикладах. У даному розділі продемонстровані основні процедури моделювання в COMSOL MULTIPHYSICS на найпростіших прикладах. Відзначимо, що відбувається інтенсивний розвиток програмних продуктів чисельного моделювання, а отже, розроблювачами часто міняється інтерфейс. Ілюстрації в цьому посібнику наведені з COMSOL MULTIPHYSICS версії "5.4" із застосуванням загальної концепції для всіх версій COMSOL MULTIPHYSICS.

В COMSOL MULTIPHYSICS існує БІБЛІОТЕКА МОДЕЛЕЙ (MODEL LIBRARY), у якій наведені розв’язки ряду складних фізичних і математичних задач. Кожний додатковий модуль включає власний набір моделей, у яких на прикладах показується, як використовувати модуль у його прикладній області.

Розглянемо роботу з БІБЛІОТЕКОЮ МОДЕЛЕЙ (MODEL LIBRARY) на прикладі розділу EQUATION-BASED MODELS (рис.37), який призначений для прикладів математичного модуля MATHEMATICS.

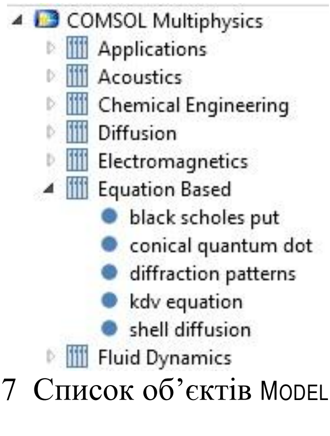


Рис. 37 Список об’єктів MODEL LIBRARY

11.1 Одномірне рівняння Кортевега-Де Фріза

Одномірне рівняння Кортевега-Де Фріза (КдФ), є однією з найпростіших і найбільш відомих моделей, що допускають існування солітонних розв'язків, причому одержати ці розв'язки можна в аналітичному вигляді за допомогою методу зворотної задачі розсіювання. І чисельний розв'язок цього рівняння можна зрівняти з аналітичним.

Відзначимо, що рівняння Кортевега-Де Фріза вивчається в курсі "Нелінійна математична фізика", "???? ". КдФ являє собою математичну модель хвиль на поверхні мілководдя, тобто нелінійні рівняння в частинних похідних:

$$u_t + u_{xxx} - 6 u u_x = 0, \tag{19}$$

де u_x, u_{xxx} і u_t – перша й третя частинні похідні по просторовій змінної x і перша частинна похідна від часу t відповідно, а $u = u(x, t)$ – функція цих змінних.

Одним з можливих розв'язків даного рівняння є відокремлений солітон:

$$u(x, t) = -\left|2\xi^2 \mathrm{ch}\right|^{-2} [\xi(x - 4\xi^2 t - \phi)], \tag{20}$$

де $4\xi^2$ – фазова швидкість, ϕ – довільна постійна (початкова фаза), c – швидкість хвилі, h – глибина води. Солітони з великою амплітудою виявляються більш вузькими й рухаються швидше.

Також існують n – солітонні розв'язки рівняння КдФ. Чисельне моделювання рівняння (19) з початковою умовою, яка відповідає двох-солітонному розв'язку

$$u(x,t) = -4(\xi_1^2 - \xi_2^2)\cdot$$
$$\cdot \frac{\xi_1^2 - \xi_2^2 + \xi_1^2 \,\mathrm{ch}(2\xi_2\psi_2 + \Delta) + \xi_2^2 \,\mathrm{ch}(2\xi_1\psi_1 + \Delta)}{[(\xi_1 + \xi_2)\,\mathrm{ch}(\xi_1\psi_1 - \xi_2\psi_2) + (\xi_1 - \xi_2)\,\mathrm{ch}(\xi_1\psi_1 + \xi_2\psi_2 + \Delta)]^2} \tag{21}$$

реалізоване в MODEL LIBRARY. Тут

$$\psi_1 = (x - 4\xi_1^2 t - \phi_1)],\ \psi_2 = (x - 4\xi_2^2 t - \phi_2)],\ \Delta = \ln\frac{\xi_1 + \xi_2}{\xi_1 - \xi_2} > 0.$$

При таких позначеннях $4\xi_1^2$, $4\xi_2^2$ – фазові швидкості і ϕ_1, ϕ_2 – довільні сталі, які характеризують початкову фазу першого і другого солітонів на нескінченності відповідно.

Скориставшись моделлю KDV_EQUATION з MODEL LIBRARY, побудуємо чисельний розв'язок рівняння (19) з початковою умовою (20).

На цьому прикладі легко показати основну методику, застосовувану для створення моделі в COMSOL MULTIPHYSICS. Розглянемо кожний непустий елемент KDV_EQUATION, у якому задаються значення параметрів, геометрія і т.д.

Кореневий пункт дерева моделі KDV_EQUATION.MPH (ROOT) містить загальні відомості про файл проекту:

у NODE PROPERTIES – назва файлу, шлях до його розташування, програму, у якій він створений, тег, відомості про автора проекту, дату створення, дату модифікації і т.д.;

в USED PRODUCTS – назва програмного продукту;

у MODEL IMAGE – відображається малюнок, який можна задати з метою представлення основного результату розрахунків, тощо;

в UNIT SYSTEM – система одиниць виміру (за замовчуванням використовується міжнародна система одиниць виміру СИ);

у FONT – шрифт, використовуваний у проекті, і його розміри.

Відзначимо, що для кожного створеного пункту можна одержати подібні відомості, натиснувши на ньому праву кнопку миші й викликавши його властивості (PROPERTIES).

11.2 Побудова моделі КдФ

У пункті KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => MODEL 1 (MOD1) задані:

– ідентифікатор (змінна-об'єкт) моделі (MOD1), який використовується для глобального доступу до змінних;

– система одиниць виміру (за замовчуванням використовується міжнародна система одиниць виміру СІ), цей параметр дозволяє будувати модель у системі вимірів, яка може відрізнятися від системи вимірів для представлення результатів, яка задана в кореневому пункті дерева kdv_equation.mph (ROOT);

– порядок поліномів, використовуваних для інтерполяції кінцевих елементів GEOMETRY SHAPE ORDER (максимальний порядок поліномів в COMSOL MULTIPHYSICS рівний п'яти). Короткі відомості про ці поліноми наведено в розділі 2.

Пункт KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => MODEL 1 (MOD1) => DEFINITIONS => SELECTION 1 в даній моделі створений автоматично при визначені періодичних граничних умов (їх визначення описане нижче), отже, змінити параметри прямо в ньому не можна.

Результат дії параметрів пункту KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => MODEL 1 (MOD1) => DEFINITIONS => VIEW 1 наочний.

У пункті KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => MODEL 1 (MOD1) => DEFINITIONS => VIEW 1 => AXIS задаються параметри для візуалізації (властивості системи координат) у вікні GRAPHICS: в одномірному випадку розміри по горизонталі (X MIN, X MAX), масштабування (EXTRA X) і відстань між значеннями на осях (X SPACING).

Кореневий пункт гілки дерева проекту, відповідальної за геометрію розрахункової області KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => MODEL 1 (MOD1) => GEOMETRY, дозволяє задавати одиниці виміру довжини і кутів, а також точність за замовчуванням (DEFAULT RELATIVE REPAIR TOLERANCE) при додаванні нової опції.

Усередині гілки KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => MODEL 1 (MOD1) => GEOMETRY створено два пункти:

– INTERVAL – об'єкт розрахункової області у вигляді інтервалу: тут задані розміри інтервалу. Відзначимо, що можна змінити параметр NUMBER OF INTERVALS, що дозволить розбити цей інтервал на підінтервали. Така можливість необхідна при моделюванні з особливими точками або накладенні різних умов на підінтервали;

– FORM UNION – обов'язковий пункт, у якому задана точність і значення параметра FINALIZATION METHOD, що дозволяє розглядати кілька об'єктів розрахункової області як єдине ціле або як окремі об'єкти. Наприклад, можна розглядати кілька інтервалів незалежно з умовами, які зв'язані тільки з однією із внутрішніх точок кожного інтервалу.

Наступна гілка дерева ПРОЕКТУ KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => MODEL 1 (MOD1) => PDE (G) відповідає за фізичні процеси, що протікають у розрахунковій області. У цьому випадку – це рівняння в частинних похідних. У пункті PDE (G) задається ідентифікатор (змінна-об'єкт) PDE (IDENTIFIER = G), який використовується для доступу до змінних, а також вибирається розрахункова область (DOMAINS), для якої необхідно застосувати чисельне моделювання. В DEPENDENT VARIABLES задається кількість шуканих функцій, що дозволяє вирішувати системи рівнянь або моделювати кілька взаємозалежних процесів одного типу, не прибігаючи до створення додаткових моделей. При розрахунках декількох процесів одного типу (систем рівнянь) ефективніше задавати декілька змінних усередині однієї моделі, ніж створювати кілька моделей і зв'язувати змінні одну з одною.

У гільці KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => MODEL 1 (MOD1) => PDE (G) створені підрозділи:

– GENERAL FORM PDE 1;

– ZERO FLUX 1;

– INITIAL VALUES 1;

– PERIODIC CONDITION 1;

В GENERAL FORM PDE 1 задається безпосередньо рівняння Кортевега-Де Фриза (19). При цьому використовується математична модель рівняння другого порядку (15), тому рівняння КдФ (19) презентовано у вигляді наступної системи двох рівнянь:

$$\sum_{j=1}^{2}\left\{e_a^{ij}\frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2}+d_a^{ij}\frac{\partial u_j}{\partial t}\right\}+\frac{\partial}{\partial x}\Gamma^i=f^i$$

де $i=1, 2$, $j=1, 2$, $d_a^{11}=1$, $d_a^{12}=d_a^{21}=d_a^{22}=0$, $e_a^{ij}=0$, $f^1=6u_1u_{1,x}$, $f^2=6u_2$, $\Gamma^1=u_2$, $\Gamma^2=u_{1,x}$, тобто цю систему можна переписати у вигляді

$$\begin{cases} u_{1,t}+u_{2,x}=6u_1u_{1,x}, \\ u_{1,xx}=u_2. \end{cases}$$

Тут $u_1=u$ з рівняння (19), а по символах, що стоять після коми, ведеться диференціювання (тут і далі це правило слушне для всіх позначень). Цифра один у вікні DOMAINS означає використання геометрії з індикатором один.

ZERO FLUX 1 в даній моделі за замовчуванням не використовується. Це граничні умови з нульовим потоком, які створюються в COMSOL MULTIPHYSICS автоматично при виборі процесу моделюємого PDE.

У пункті INITIAL VALUES 1 задані початкові умови, які відповідають двосолітонному розв'язку (21).

$$u_1(x,0)=\text{-}6\,\mathrm{ch}^{-2}(x[1/m]),$$

$$u_2(x,0)=\text{-}24\,\mathrm{ch}^{-2}(x[1/m])\,\mathrm{th}^2(x[1/m])+ \qquad (24)$$

$$+12\,\mathrm{ch}^{-2}(x[1/m])(1-\mathrm{th}^2(x[1/m]))$$

Тут позначення [1/*m*] необхідно для того, щоб результуюче значення всередині функції (наприклад, функції гіперболічного косинуса) було безрозмірним, тому що змінна *x* у цьому випадку вимірюється в метрах. Система рівнянь (23) є системою першого порядку за часом, отже, $u_{1,t}$ і $u_{2,t}$ задавати не потрібно. Як і у випадку GENERAL FORM PDE 1, цифра один у вікні DOMAINS означає використання геометрії з індикатором один.

За допомогою PERIODIC CONDITION 1 задані періодичні граничні умови. У вікні BOUNDARIES задані граничні точки цифрами один і два для лівого й правого кінців розрахункового інтервалу відповідно. У вікні PERIODIC CONDITION заданий тип періодичності і визначено застосовувати дані граничні умови до обох змінних системи (23), що є природнім, тому що ця система моделює одне рівняння КдФ третього порядку.

У гільці KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => MODEL 1 (MOD1) => MESH 1 розташовано два підрозділи:

– SIZE;

– EDGE 1;

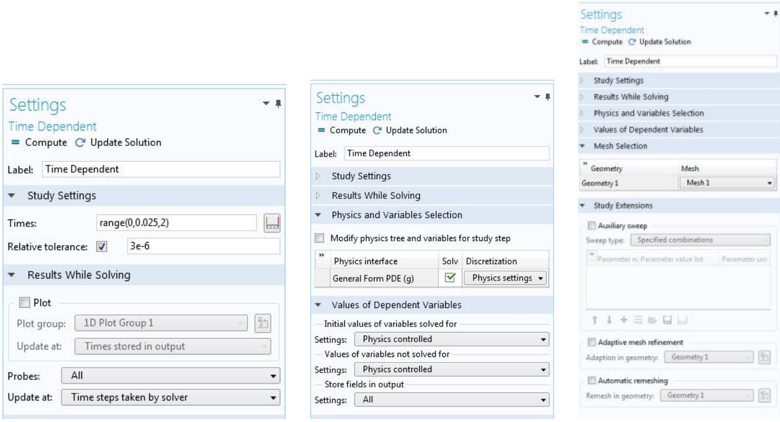
У підрозділі SIZE задані параметри кінцевих елементів, на які розділюється розрахункова область. Способи завдання цих параметрів описано в розділі 8. Відзначимо, що у випадку рівняння КдФ розділення проведено регулярним чином, тобто всі кінцеві елементи однакові й рівномірно розподілені по інтервалу розрахункової області. Підрозділ EDGE 1, якщо він або альтернативний йому не створений, створюється автоматично при запуску чисельного розрахунку.

Таким чином, в MODEL 1 (MOD1) реалізована постановка задачі, задані необхідні параметри, початкові й граничні умови, а також зроблене розділення розрахункової області на кінцеві елементи. Будь-яка модель в COMSOL MULTIPHYSICS при підготовці до чисельного розрахунку повинна мати подібну структуру.

11.3 Чисельний розв’язок рівняння КдФ (STUDY 1)

Гілка дерева проекту KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => STUDY 1 призначена для визначення параметрів і методів чисельного розрахунку, тобто конфігурування вирішувачів (дивись розділ 9).

Перший підпункт у цій гільці STEP1: TIME DEPENDENT містить: STUDY SETTINGS, MESH SELECTION, PHYSICS SELECTION.



а б в

Рис. 38 Зміст підпункту TIME DEPENDENT

На рис.38а (STUDY SETTINGS) показані параметри, задані для інтервалу часу, на якому проводиться розрахунок. На рис.38б (MESH SELECTION) показана обрана розрахункова область (GEOMETRY 1) і розділення (MESH 1), для яких повинне проводитися чисельне моделювання. На рис.38в (PHYSICS SELECTION) показана обрана математична модель процесу (PDE (G)). Відзначимо, що в цьому випадку в MESH SELECTION і PHYSICS SELECTION наданий однозначний вибір, тому що в проекті KDV_EQUATION не створено інших варіантів розрахункової області, розділення і математичної моделі.

У другому підпункті KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => STUDY 1 => SOLVER CONFIGURATIONS, що містить SOLVER 1, задаються параметри вирішувачів у наступних елементах гілки:

– У COMPILE EQUATIONS: TIME DEPENDENT вказується, яку зі створених гілок STUDY використовувати (у даному випадку це один об’єкт – STUDY 1) і який з об’єктів типу STEP використовувати (у даному випадку це один об’єкт – STEP1: TIME DEPENDENT) (рис.39).

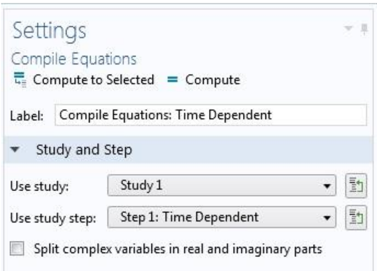
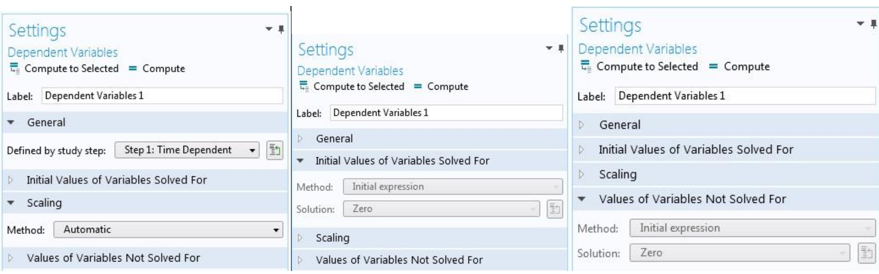


Рис. 39 Вікно COMPILE EQUATIONS

– У DEPENDENT VARIABLES 1 => INITIAL VALUES (рис.40а) задане значення параметра METHOD = INITIAL EXPRESSION, що означає використання в якості початкових значень змінних (u_1, u_2) при чисельних розрахунках вираження, які визначені на вузлах початкових значень типу моделі (наприклад PDE). Можна вибрати METHOD = SOLUTION, тоді програма буде використовувати в якості початкової умови значення змінних (u_1, u_2) у той відомий момент часу, який заданий у параметрі SOLUTION (рис.40а), тобто SOLUTION дозволяє продовжити розрахунки з деякого вже розрахованого моменту. Можливість використання результатів розрахунків у якості нових початкових умов є зручним інструментом при моделюванні, тому що це не тільки дозволяє продовжити розрахунки далі за часом, але й почати розрахунки з деякого моменту, у якому з'явилося велике накопичення помилок, збільшивши кількість кінцевих елементів в області з великим значеннями градієнта.



а б в

Рис. 40 Елементи налаштування DEPENDENT VARIABLES

В DEPENDENT VARIABLES 1 => SCALING (рис.40б) задане значення параметра METHOD = AUTOMATIC, що означає використання методу масштабування за замовчуванням. Відзначимо, що існує можливість задавати спосіб масштабування. В DEPENDENT VARIABLES 1 => VARIABLES NOT SOLVED FOR (рис.40в) задане значення параметра METHOD = INITIAL EXPRESSION, що застосовується у випадку, коли є декілька змінних з різних моделей (наприклад, у проекті є модель PDE і модель AC/DC), значення яких необхідно використати окремо у вирішувачах. У моделі КдФ це не використовується.

В DEPENDENT VARIABLES 1 => OUTPUT (рис.40б) задане значення параметра KEEP SOLUTION = INITIAL VALUES, яке вказує, що потрібно використовувати для процесу обробки результатів.

Також DEPENDENT VARIABLES 1 містить шукані змінні моделі з їхніми властивостями, визначеними в області FILD (рис.41). У даній моделі присутні дві змінні, які позначені з використанням ідентифікатора (MOD1) у такий спосіб: MOD1.U1 і MOD1.U2. Область FILD містить параметри SOLVE FOR THIS FIELD і STORE IN OUTPUT, які задають пріоритет використання для змінної DEPENDENT VARIABLES 1 => INITIAL VALUES або DEPENDENT VARIABLES 1 => VARIABLES NOT SOLVED FOR, а також область масштабування SCALING із заданим значенням параметра METHOD = FROM PARENT, що означає використання методу масштабування з DEPENDENT VARIABLES 1 => SCALING.

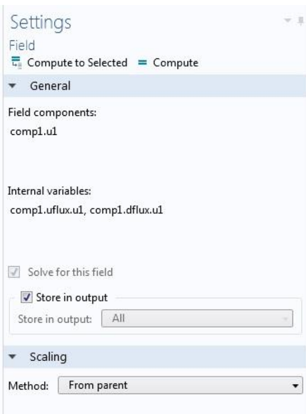
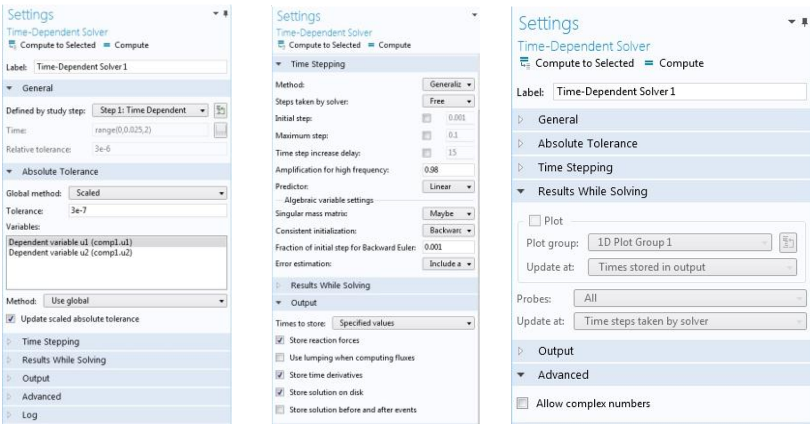


Рис. 41 Налаштування шуканих змінних моделі в полі FILD

– TIME-DEPENDENT SOLVER 1 – це основний підрозділ меню вирішувача, у якому задаються всі необхідні налаштування. У підобласті GENERAL задане значення параметра TIMES =

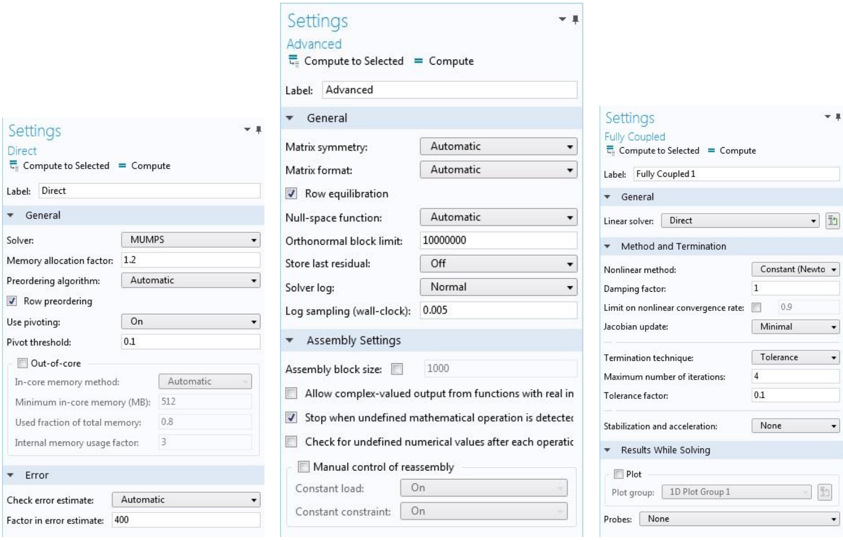
range(0,0.025,2), яке застосовується при розрахунках, і його значення за замовчуванням дорівнює значенню параметра Times з Step1: Time Dependent, а значення параметра Relative Tolerance = 0.0001 (рис.42а). Також в Absolute Tolerance задані відповідні значення параметрів точності для шуканих змінних (mod1_u1 і mod1_u2), необхідні при розрахунках на кожному кроці за часом, і методи їх масштабування (дивися розділ 9). На рис.42б-в показані застосовані для рівняння КдФ метод розрахунків Generalized alpha й часовий вирішувач Free, їхні характеристики, а також параметри, які вказують, які значення потрібно використовувати в якості вихідних даних. В Advanced (рис.42в) задаються параметри, які визначають, чи включає система диференціально-алгебраїчні рівняння, указує чи використовувати вирішувачу послідовну ініціалізацію диференціально-алгебраїчних систем і задається спосіб оцінки помилки дискретизації часу. Відзначимо, що в Results while Solving (рис.42в) можна включити графічне відображення результатів під час розрахунків, що є актуальним при дослідженні процесів, які необхідно контролювати.



а б в

Рис. 42 Time-Dependent Solver 1 – основний підрозділ меню вирішувача, у якому задаються всі необхідні налаштування

Всередині гілки kdv_equation.mph (root) => Study 1 => Solver Configurations => Solver 1 => Time-Dependent Solver 1 (рис. 43) доступні наступні пункти (сенс яких коротко описано в розділі 9):



а б в

Рис. 43 Вікна налаштування вирішувача

- В Direct задани параметри вирішувача MUMPS (рис.43а), який дозволяє вирішувати системи лінійних рівнянь. В Error задаються параметри, за допомогою яких можна управляти точністю розв'язку лінійної системи.

- Advanced (рис.43б) оперує з параметрами налаштування для операційних особливостей. Тут задано операцію з матричною симетрією системи лінійних рівнянь і обраний автоматичний режим (Matrix Symmetry = Automatic), що виконує автоматичне виявлення симетрії. Використання Row equilibration проводить перевірку балансування, щоб зберегти матричну симетрію. Значення (Nul-space function = Automatic) задається автоматично, вибирає метод для обчислення відповідної матриці системи лінійних рівнянь для обробки обмежень. Інші параметри даного розділу відносяться до детального налаштування чисельного моделювання й тут не розглядаються, тому що їхня актуальність стає істотною в особливих випадках.

- В Fully Coupled 1 (рис.43в) зазначені використовуваний лінійний вирішувач (Linear solver = Direct) і метод визначення коефіцієнта загасання (DAMPING METHOD = CONSTANT) з його параметрами.

11.4 Представлення результатів моделювання КдФ

Гілка дерева KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => RESULTS призначена для аналізу отриманих результатів.

В DATA SETS для рівняння КдФ записані числові значення результатів чисельного моделювання. Для цього використовується змінна SOLVER 1 з моделі MODEL 1, яка привласнена параметру SOLUTION в гільці KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => RESULTS => DATA SETS => SOLUTION 1 (рис.44). Також в SOLUTION 1 зазначені значення параметрів, які дозволяють виконати візуалізацію і аналіз результатів в MESH, MATERIAL, SPATIAL (параметр FRAME) і повернути отриманий результат на деякий кут, тобто представити його у вигляді проекції (параметр SOLUTION AT ANGLE (PHASE)). Відзначимо, що змінна SOLVER 1 є набором даних.

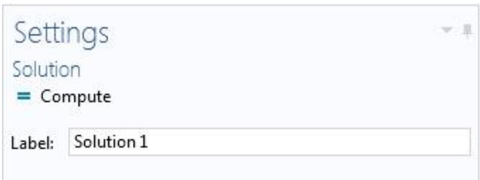


Рис. 44 Вікно визначення параметру SOLUTION

Гілка KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => RESULTS => DATA SETS => PARAMETRIC EXTRUSION 1D 1 (рис.45) призначена для представлення отриманих даних у вигляді поверхні, тобто множина значень змінної SOLVER 1 записується в множину значень нової змінної PARAMETRIC EXTRUSION 1D 1, але представлених в іншому запису. Для одномірного випадку (для рівняння КдФ) у змінну SOLVER 1 записані значення шуканих MOD1_U1 і MOD1_U2 як множина наборів даних, по кожному з яких можна побудувати одномірний графік для різних моментів часу, а в змінну PARAMETRIC EXTRUSION 1D 1 записані ті ж дані у вигляді матриці, тобто графічне представлення цієї змінної відповідає поверхням для MOD1_U1 і MOD1_U2. При графічному відтворені цих поверхонь на осях задані час, координата й значення MOD1_U1, або MOD1_U2, або деяка функція від MOD1_U1 і MOD1_U2. Відзначимо, що в PARAMETRIC EXTRUSION

1D 1 набори даних з SOLVER 1 можна включати вибірковим чином.

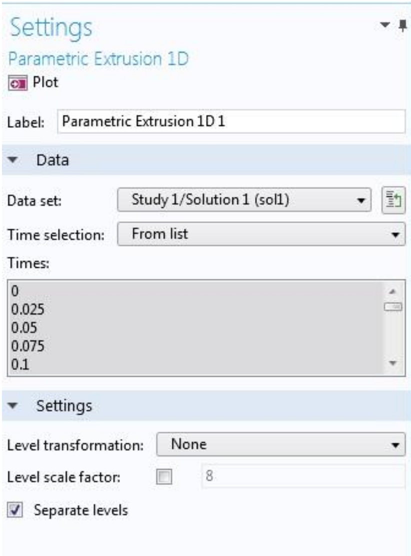


Рис. 45 Представлення отриманих даних у вигляді поверхні

Гілка KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => RESULTS => VIEWS призначена для завдання параметрів візуалізації, тобто розташування камери, джерел світла, визначення видимої області і т.д., які необхідні для відображення графічного відтворення. Тут не розглядається використання даної гілки у силу тривіальності завдання її параметрів.

Наступна непуста гілка – це KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => RESULTS => 1D PLOT GROUP 1.

1D PLOT GROUP 1 призначений для представлення одномірних залежностей. У ньому можливе створення різного роду дочірніх об’єктів (графіків), які використовують властивості 1D PLOT GROUP 1. Ці властивості (SETTINGS рис. 46) складаються з:

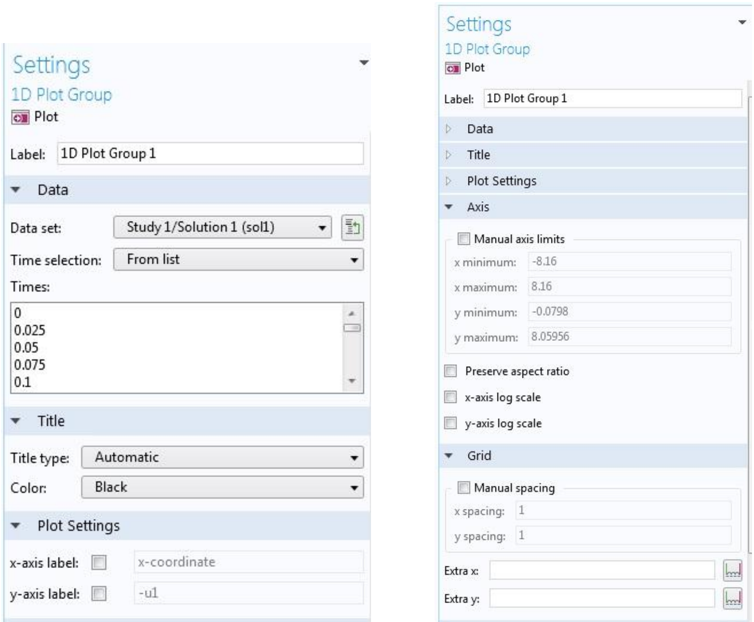
– DATA (рис.46а) – тут: у параметрі DATA SET вказується набір даних (для КдФ змінна SOLVER 1), який необхідно використовувати для побудови дочірніх об’єктів, у параметрі SELECT VIA вказується, чи застосовувати тільки значення з набору даних (змінної SOLVER 1), або зробити інтерполяцію для параметра

TIMES;

– PLOT SETTINGS (рис.46а) – дозволяє привласнити мітки осям і назву рисунку;

– AXIS AND GRID SETTINGS (рис.46б) – містить налаштування осей координат;

– PLOT IN WINDOW SETTINGS (рис.46а) – дозволяє задати назву нового вікна із графіком при його створенні.



а б

Рис. 46 Властивості 1D PLOT GROUP для створення дочірніх об’єктів (графіків)

Для графічного представлення розв’язку рівняння КдФ в 1D PLOT GROUP 1 створений об’єкт LINE GRAPH 1 з наступними властивостями (SETTINGS рис.47):

– в DATA (рис.47а) визначається параметр DATA SET аналогічно однойменному параметру в 1D PLOT GROUP 1;

– в SELECTION (рис.47а) вказується область, для якої застосовується графічне представлення (будується графік);

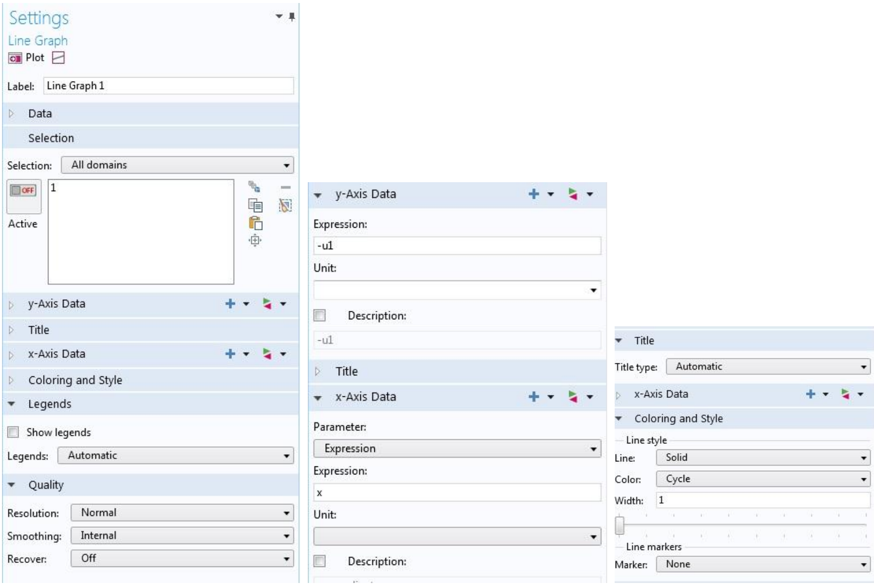
– в Y-AXIS DATA (рис.47б) задається змінна, відкладена по осі Y (для рівняння КдФ, представленого у вигляді системи (23), це змінна u_1, тобто EXPRESSION = U1);

– в X-AXIS DATA (рис.47б) задається змінна, відкладена по осі X (для даної моделі це змінна x, тобто EXPRESSION = X);

– COLORING AND STYLE (рис. 47в) задає стиль і колір ліній графічного відображення (графіків), а також дає можливість застосування маркерів;

– LEGENDS (рис.47а) надає можливість використання легенди;

– QUALITY (рис.47а) дозволяє задавати параметри якості.



а б в

Рис. 47 Вікна визначення властивостей об'єкта LINE GRAPH 1

Гілка KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => RESULTS => 2D PLOT GROUP 2 в даному проекті призначена для представлення отриманого розв'язку у вигляді поверхні u_1 (x, t). У 2D PLOT GROUP 2 визначаються наступні властивості: DATA, PLOT SETTINGS, PLOT IN WINDOW SETTINGS. Налаштування 2D PLOT GROUP 2 виконуються аналогічно 1D PLOT GROUP 1, а в якості набору даних використовується PARAMETRIC EXTRUSION 1D 1.

В 2D PLOT GROUP 2 створена поверхня SURFACE 1, в якій задаються значення параметрів DATA SET, EXPRESSION і т.д., які дозволяють управляти властивостями поверхні. Принцип завдання цих параметрів очевидний, і вивчити вплив на відображення поверхні нескладно самостійно.

Природно, що для адекватного графічного відтворення поверхні її необхідно розташувати в трьохмірному просторі. Для цього усередині SURFACE 1 створений об’єкт HEIGHT EXPRESSION 1, який створює систему координат у трьохмірному просторі і поміщає в неї поверхню SURFACE 1. HEIGHT EXPRESSION 1 використовує візуалізацію, задану в гілці KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => RESULTS => VIEWS => VIEW 3D 3, і має властивості EXPRESSION і SCALE.

Відзначимо, що остання гілка KDV_EQUATION.MPH (ROOT) => RESULTS => REPORT, хоча і порожня в моделі KDV_EQIATION, надає численні зручні можливості для аналізу результатів розрахунків у випадку її використання.

11.5 Графічна представлення результатів розв’язку рівняння КдФ в KDV_EQUATION

Описана вище модель рівняння КдФ дозволяє провести чисельний аналіз розв’язків цього рівняння. У моделі KDV_EQUATION з MODEL LIBRARY за замовчуванням вирішене рівняння КдФ, що відповідає двосолітонному розв’язку, і створене графічне одномірне і двомірне відображення отриманих результатів.

Одномірне відображення має вигляд, показаний на рис.48. Тут побудовані графіки функції u_1 (x, t_i), де t_i – кожний момент часу з інтервалу, заданого в параметрі TIMES з TIMEDEPENDENT SOLVER 1. Вочевидь, що таке відображення результатів розрахунків для аналізу не є зручним, і при написанні наукових праць або інших матеріалів необхідно створювати більш підходяще одномірне графічне відображення отриманих даних. COMSOL MULTIPHYSICS надає численні можливості для якісного графічного відображення даних.

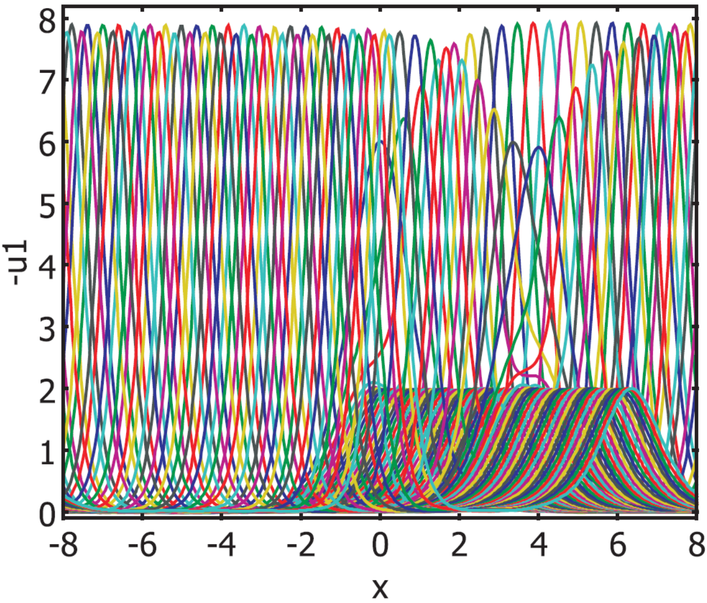
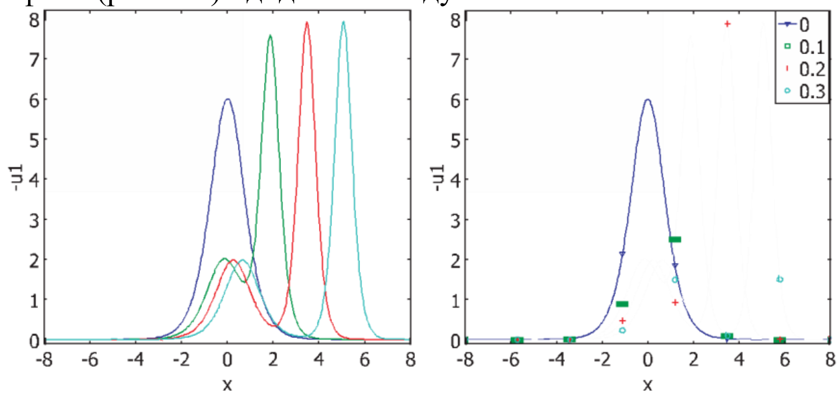


Рис. 48. Одномірне відображення всіх просторових залежностей u_1 на кожному кроці інтервалу, заданого в параметрі TIMES

Наприклад, дані, які відображенні на рис.48 при завданні відповідних параметрів можна відобразити для декількох обраних значень t_i (рис.49а), а також змінити саме відображення графіків (рис.49б) і додати легенду.



а б

Рис. 49 Графічна відображення даних при визначені відповідних параметрів для декількох обраних значень t_i

Відзначимо, можливості COMSOL MULTIPHYSICS у налаштуваннях графічного відображення сильно обмежені. Можна одержати якісні наочні рисунки практично для будь-якої ситуації, але вони, як правило, не відповідають державному стандарту, або вимогам журналів, у яких повинні бути опубліковані, тому доводиться використовувати зовнішні графічні редактори для вирішення подібних проблем. Найбільш ефективно підготовлений в COMSOL MULTIPHYSICS рисунок, який відповідає стандарту або цікавить нас, для подальших змін в інших редакторах містить потрібний шрифт чисел і букв, колір, суцільні і пунктирні лінії графіків, легенду, якщо вона потрібна, тощо.

11.6 Завдання до розділу

1) Відкрити модель рівняння КдФ із MODEL LIBRARY і:

а) змінити розділення на кінцеві елементи з рівномірного на гармонійне, провести розрахунки, а в якості методу для часового вирішувача використовувати BDF. Варіюючи параметри методів розрахунків і розділення, знайти умови, при яких чисельний розв’язок не буде сходитися;

б) побудувати графік часової залежності середнього значення величини *x*, пояснити отриманий результат. Знайти графіки середніх значень кожного із двох солітонів, отриманих у цій моделі;

в) побудувати анімацію процесу взаємодії солітонів, побудувати траєкторію руху солітонів у просторі *x*, *t*;

г) створити таблицю отриманих результатів і експортувати її в MICROSOFT EXCEL, порахувати енергію солітонів і побудувати графік її залежності від часу;

д) знайти дисперсію кожного із солітонів залежно від часу і представити її в графічному вигляді.

2) * Провести аналіз моделі EIGENMODES OF A ROOM аналогічно тому, як це зроблене для рівняння КдФ.

3) * Провести аналіз моделі EFFECTIVE DIFFUSIVITY IN POROUS MATERIALS аналогічно тому, як це зроблене для рівняння КдФ.

4) * Провести аналіз моделі DIFFRACTION PATTERNS аналогічно тому, як це зроблене для рівняння КдФ.

Символ * означає підвищену складність задачі.

12 ВИСНОВОК

COMSOL Multiphysics базується на методах кінцевих елементів, тому в посібнику розглянуті базові різновиди кінцевих елементів, основні принципи ділення розрахункових областей на них і елементарні функції, застосовувані для апроксимації базових кінцевих елементів.

У даному посібнику наведені основні принципи роботи COMSOL Multiphysics з докладно розібраними прикладами орієнтованими на чисельне моделювання складних фізичних систем. Із прикладів очевидно, що широкі можливості цього програмного продукту дозволяють вирішувати складні фізичні, математичні і технічні задачі, не заглиблюючись у програмування й детальне вивчення чисельних методів. Поставлені задачі можуть мати науковий, педагогічний і прикладний характер. Обчислювальна потужність COMSOL Multiphysics базується головним чином на нових вирішувачах для різних типів моделей. Кожний з вирішувачів має чисельні налаштування, що дозволяє варіювати точність, якість і швидкість обчислень, але вимагає розуміння принципів і методів чисельного моделювання. В COMSOL Multiphysics є досить ефективні конструкції, що дозволяють обробляти результати розрахунків, будувати їхні графічні представлення і анімацію.

Використання послідовності вивчення принципів роботи COMSOL Multiphysics стосовно до моделювання складних фізичних систем представлене в даному посібнику допоможе навчитися ефективно створювати моделі, робити потрібні розділення розрахункової області, правильно вибирати і набудовувати вирішувачі, аналізувати й наочно представляти отримані результати.

ЛІТЕРАТУРА

1. Сайт компанії розроблювача пакета COMSOL Multiphysics [Електронний ресурс] / www.comsol.com. Режим доступу: http://www.comsol.com/, вільний.
2. Вікіпедія вільна енциклопедія [Електронний ресурс] / wikipedia.org. Електрон. дан. Б.м., 2019. Режим доступу: http://wikipedia.org/, вільний.
3. Melosh R.J. Basis for Derivation of Matrices for the Direct Stiffness Method // J. Am. Inst. For Aeronautics and Astronautics. 1965. №1. P.1631-1637.
4. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979. 393 с.
5. Сайт компанії розроблювача пакета MATLAB [Електронний ресурс] / www.mathworks.com. Режим доступу: http://www.mathworks.com/, вільний.
6. Hindmarsh A.C., Brown P.N., Grant K.E., Lee S.L., Serban R., Shumaker D.E. and Woodward C.S. SUNDIALS: Suite of Nonlinear and Differential/Algebraic Equation Solvers // ACM T. Math. Software 2005. V. 31. P. 363.
7. Brown P.N., Hindmarsh A.C. and Petzold L.R. Using Krylov Methods In the Solution of large-scale Differential-algebraic Systems // SIAM J. Sci. Comput. 1994. V. 15. P. 1467-1488.
8. Chung J., Hulbert G.M. A Time Integration algorithm for Structural Dynamics with Improved numerical Dissipation: The generalized-α Method // J. Appl. Mech. 1993. V. 60. P. 371-375.
9. Jansen K.E., Whiting C.H., Hulbert G.M. A generalized-α Method for Integrating the filtered Navier-Stokes equations with a Stabilized finite Element Method // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 2000. V. 190. P. 305-319.
10. Лабораторія інформатики й паралельних обчислень [Електронний ресурс] / graal.ens-lyon.fr, Режим доступу: http://graal.ens-lyon.fr/MUMPS/, вільний.
11. Проект PARDISO [Електронний ресурс] / www.pardiso- Project.org, Режим доступу: http://www.pardiso-project.org/, вільний.
12. Сховище NETLIB [Електронний ресурс] / www.netlib.org, Режим доступу: http://www.netlib.org/linalg/spooles, вільний.

13. Greenbaum A. Iterative Methods for Linear Systems. Frontiers In Applied Mathematics. 17. SIAM. 1997. 220p.

14. Saad Y. and Schultz M.H. GMRES: A generalized Minimal Residual algorithm for Solving nonsymmetric linear Systems // SIAM J. Sci. Statist. Comput. 1986. V. 7. P. 856-869.

15. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Boston, 1996. 529 P.

16. Saad Y. A flexible Inner-outer Preconditioned GMRES algorithm // SIAM J. Sci. Statist. Comput. 1993. V. 14. P. 461-469.

17. Van Der Vorst H.A. A fast and Smoothly Converging variant of Bicg for the Solution of nonsymmetric linear Systems // SIAM J. Sci. Statist. Comput. 1992. V. 13. P. 631-644.

18. Hestenes M.R. and Stiefel E. Methods of Conjugate gradients for Solving linear Systems // J. Res. Nat. Bur. Standards 1952. V. 49. P. 409-435.

19. Lanczos C. Solutions of linear equations by Minimized Iterations // J. Res. Nat. Bur. Standards. 1952. V. 49. P. 33-53.

20. Лиони Ж.Л. Некоторые методы решения нелинейных краевых задач. М.: Мир, 1972. 588 с.

21. Кружков С.Н. Фаминский А.В. Обобщённые решения для уравнения Кортевега-Де Фриза // Матем. сборник. 1983. Т. 120(162). С. 396-445.

22. Gardner C.S., Green J.M., Kruskal M.D., Miura R.M. Method for Solving the Korteweg-de Vries equation // Phys.Rev.Lett. 1967. V. 19. P. 1095-1097.

23. Шабат А.Б. Об уравнении Кортевега-Де Фриза // ДАН СССР. 1973. Т. 211. С. 1310-1313.

24. Фаминский А.В. Граничные задачи для уравнения Кортевега-Де Фриза и его обобщений: Дис.... докт. физ.-матем. наук. М. РУДН. 2001.

25. Miura R.M., Gardner C.S., Kruscal M.D. Korteweg-de Vries equation and generlization. II. Existence of Conservation laws and Constants of Motion. // J. Math. Phys. 1968. V. 9. P. 1204-1209.